



# Simulateurs de Procédés

## Introduction au Logiciel HYSYS

Slimane MEROUANI





# CHAPITRE I

## Généralités

### 1. Qu'est-ce qu'un procédé industriel

Un procédé industriel est un assemblage de plusieurs opérations unitaires (colonnes de distillation, pompes, compresseurs, séparateurs, échangeurs, ...) destiné à produire des objets ou à synthétiser des produits chimiques, en grande quantité et dans des conditions techniquement et économiquement acceptables.

### 2. Conception et simulation d'un procédé

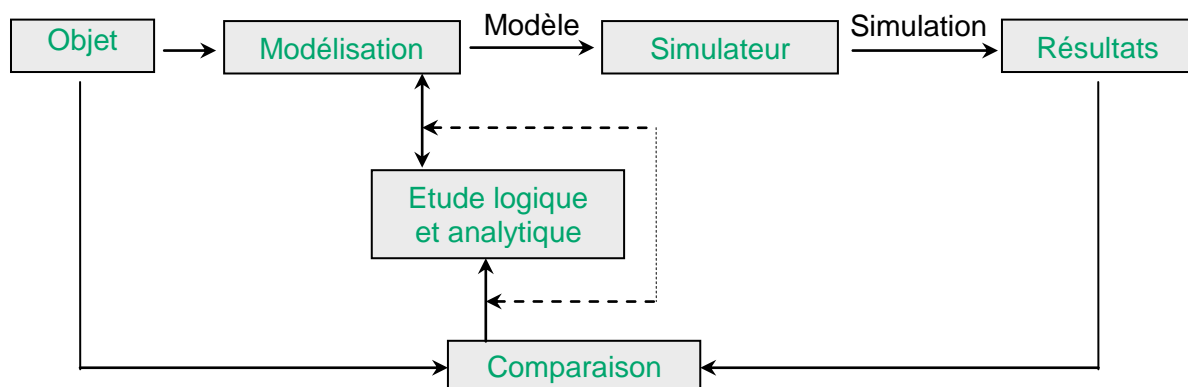
La conception d'un procédé industriel est une opération complexe qui demande des moyens financiers et humains très importants. Dans le contexte actuel, un procédé industriel doit répondre à trois critères :

- l'économie,
- la sécurité,
- l'environnement.

Ainsi, lorsqu'un nouveau procédé est développé, le rôle de l'ingénieur de procédé consiste à trouver le système le plus adapté non seulement en terme d'efficacité et de sécurité, mais aussi de coût et de rentabilité pour fabriquer le produit. A ce titre, la simulation peut être d'une aide très précieuse pour concevoir rapidement et économiquement de nouveaux procédés plus rentables, mais également pour analyser et optimiser le fonctionnement des installations existantes. Ce domaine d'activité est désigné par le terme « **d'ingénierie des procédés assistée par ordinateur** ».

#### 2.1. Modèle et simulation

Lorsque le système réel que l'on souhaite observer devient trop complexe et que de nombreuses variables sont en jeu, la modélisation intervient pour prendre en charge et traiter les problèmes : un modèle est élaboré pour essayer de rendre compte de la complexité du système tout en essayant de réduire le nombre de paramètres.



**FIGURE 1** : Schéma nécessaire pour la modélisation et la simulation d'un processus

L'analyse du système, la modélisation et la simulation constituent les trois étapes fondamentales de l'étude du comportement dynamique des systèmes complexes (procédé) :

- ♦ **L'analyse du système** consiste à définir les limites du système à modéliser, à identifier les éléments importants ainsi que les types de liaison et d'interaction entre ces éléments et à les hiérarchiser.
- ♦ **La modélisation** vise à représenter de la meilleure façon possible un objet réel par un ou des modèles sous forme mathématique. D'une manière générale, lors de l'élaboration du modèle, trois types de données sont nécessaires :
  - les paramètres chimiques (réactions, produits formés, cinétiques et mécanismes),
  - les paramètres de transfert (matière, énergie, quantité de mouvement),
  - l'hydrodynamique caractérisant les équipements.
- ♦ **La simulation** étudie le comportement d'un système. Elle permet, en particulier, d'étudier l'évolution du système en faisant varier un ou plusieurs facteurs et en confrontant les valeurs calculées aux valeurs observées.

### 3. Simulateurs

Un simulateur est l'outil de mise en œuvre de la simulation du système. Il présente donc sous des conditions contrôlables et observables l'évolution du modèle du procédé. Les simulateurs permettent d'établir aisément et avec rigueur les bilans matière et énergie sur les procédés.

#### 3.1. Objectifs des simulateurs

Les objectifs majeurs des simulateurs de procédés sont les suivants :

- résoudre les équations de bilans matière et énergie pour l'ensemble des appareils du procédé,
- calculer les caractéristiques (débit, composition, température, pression, propriétés physiques) pour tous les fluides qui circulent entre les appareils ;
- fournir les éléments nécessaires au dimensionnement des équipements, tels que les quantités de chaleur échangées ou les débits internes d'une colonne.

À ces objectifs, s'ajoutent :

- l'estimation des coûts d'investissement et de fonctionnement et, dans un contexte de développement durable, de l'impact sur l'environnement et la sécurité,
- l'optimisation des conditions de fonctionnement du procédé.

On comprend alors aisément pourquoi ils constituent les outils de base pour la conception des procédés assistée par ordinateur. Les autres applications des simulateurs concernent l'analyse du fonctionnement d'une unité existante ou l'étude des modifications à apporter pour adapter l'unité à un nouveau contexte industriel : Adaptation à la demande du marché ou à de nouvelles réglementations concernant l'environnement ou la sécurité.

#### 3.2. Types de simulateurs

Deux types de simulateurs sont largement utilisés pour la simulation des procédés industriels :

- simulateurs modulaires séquentiels,
- simulateurs basés sur les équations.

##### a. Simulateurs modulaires séquentiels

Dans le simulateur modulaire séquentiel, le diagramme du procédé (process flowchart) est dessiné en utilisant une série d'unités du procédé : agitateur, séparateur, unité de séparation « flash », colonne à distiller, réacteur à conversion fixe, échangeur de chaleur... Ces unités standards sont appelées « blocs », « modules » ou « unités de simulation ».

Un programme informatique, par module, prend les données des courants d'entrée et calcule les propriétés des courants de sortie. Ces calculs sont réalisés de gauche à droite, unité par unité, jusqu'à ce que toutes les variables soient calculées.

### b. Simulateurs basée sur les équations du procédé

Cette méthode implique le rassemblement de toutes les équations du procédé et résolvant simultanée pour calculer les variables inconnues.

## 3.3. Eléments constitutifs d'un simulateur de procédé

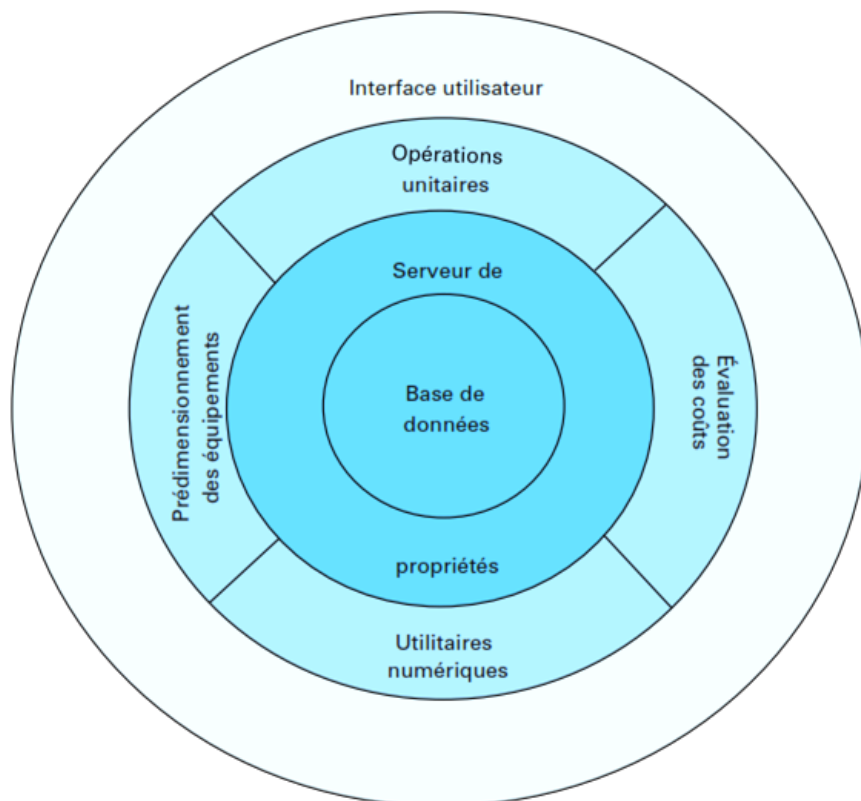
Les différents éléments d'un simulateur sont présentés sur la Figure 2.

### a. Base de données

La base de données stockent tous les constantes physico-chimiques des espèces chimiques pures (masse molaire, coordonnées critiques, point normal d'ébullition...), les paramètres des corrélations pour le calcul de leurs propriétés qui sont fonction de la température (chaleur spécifique du gaz parfait, pression de vapeur saturante, viscosité...) et les paramètres d'interaction binaire relatifs aux modèles de coefficients d'activité.

### b. Serveur de propriétés

Le serveur de propriétés repose sur les bases de données des corps purs et binaires précédemment décrites et sur des modèles thermodynamiques pour délivrer toutes propriétés thermodynamiques (équilibres entre phases), physico-chimiques et de transfert nécessaires à la simulation.



**FIGURE 2 :** Eléments constitutifs d'un simulateur de procédés

### c. Utilitaires numérique

Comporte de toutes les méthodes numériques nécessaires susceptibles d'être utilisés lors de la simulation du procédé.

## 4. Logiciels de simulation des procédés

Il existe un très grand nombre de logiciels de simulation des procédés chimiques sur le marché. Ci-après, on présente une liste des logiciels les plus utilisés au niveau mondial :

<http://www.aspentec.com/> (Aspen)  
<http://www.chemstations.net/> (Chemcad)  
<http://www.winsim.com/> (DesignII)  
<http://www.hyprotech.com/> (Hysys)  
<http://www.ideas-simulation.com/home.php> (Ideas)  
<http://www.rsi-france.com/> (Indiss)  
<http://www.prosim.net/english.html> (Prosim)  
<http://www.simsci-esscor.com/us/eng/default.htm> (Proll)  
<http://www.rsi-france.com/> (Sim42)

Le logiciel dont nous disposons est le logiciel HYSYS de la société Hyprotech qui est une filiale du groupe AspenTech.

### 4.1. Présentation de HYSYS

HYSYS a été développé principalement pour l'industrie du pétrole, bien qu'il soit utilisé pour d'autres types de procédés chimiques. Ce logiciel :

- dispose d'une interface graphique simple pour la construction des diagrammes du procédé (PDF – Process Flow Diagrams),
- fait les calculs nécessaires dès que le minimum de données suffisant pour le calcul est entré,
- Ajuster automatiquement les résultats de calcul avec n'importe quel changement dans les données d'entrées,
- Facilite la disposition des erreurs et de leurs corrections.

Pour réaliser une simulation en HYSYS, les pas suivants sont nécessaires :

#### a. Choix des composés (Components)

Il y a beaucoup de composés dans la bibliothèque et ils sont classés en groupes (traditionnel, hypothétique, électrolyte). Les composés peuvent être trouvés en utilisant des filtres et ajoutés à la liste des composés du procédé à simuler.

Lorsqu'un composé n'est pas dans la bibliothèque du logiciel. Le problème peut être surmonté en définissant un composé hypothétique, avec une quantité minimale de propriétés de base spécifiées par l'utilisateur. L'ensemble complet des propriétés pour le composé sera alors estimé par le logiciel.

#### b. Choix du modèle thermodynamique (Fluide Package)

L'utilisateur doit sélectionner le modèle thermodynamique à utiliser pour calculer les propriétés de mélange (masse volumique, enthalpie,...) ainsi que pour calculer l'équilibre de phases dans les courants et dans les unités de séparation.

Le modèle le plus simple suppose un comportement de gaz idéal pour la phase gaz et un comportement de solution idéal pour la phase liquide. Donc, on utilise la loi de Raoult pour les calculs de l'équilibre de phases. Dans HYSYS, ce modèle est appelé « Antoine », parce qu'il utilise l'équation d'Antoine pour le calcul des pressions de vapeur. Les propriétés de mélange pour le liquide sont calculées à partir des moyennes des propriétés individuelles.

Pour les mélanges d'hydrocarbures légers, les équations d'état, telle que celle de Peng-Robinson, ou celle de Soave-Redlich-Kwong ou une méthode d'états correspondants comme celle de Lee-Kesler



Plocker, sont utilisées couramment. Celles-ci peuvent être trouvées à l'aide du filtre EOS (*Equations of State*).

Pour des composés présentant un caractère de solution non-idéale (i.e. éthanol + eau), un modèle de type « loi de Raoult modifiée » doit être utilisé. Ceux-ci sont appelés « modèles à coefficient d'activité ». Ils peuvent être trouvés avec le filtre « Activity Models ». Quelques exemples sont les modèles NRTL et UNIQUAC.

Il existe d'autres modèles spéciaux dans HYSYS, notamment pour estimer les propriétés de l'eau (y compris en phase vapeur) et pour les électrolytes.

### c. Etablir le diagramme du procédé (PFD – Process Flow Diagram)

La base d'une simulation est le développement du PFD. Ceci est fait en sélectionnant des unités dans la palette d'objets et en les déposant sur la feuille du procédé. De même, tout courant de matière et d'énergie doit être placé sur le PFD. Chaque courant d'entrée ou de sortie est connecté à une unité. Les courants et les unités sont nommés et ordonnés sur le PFD afin de faciliter la compréhension du diagramme du procédé.

Les calculs sont exécutés successivement de gauche à droite, alors la procédure consiste à définir les courants d'alimentation (sur le côté gauche des unités). Ensuite, introduire autant de spécifications que nécessaires pour la première unité rencontrée, afin de pouvoir la calculer. Cette procédure est valable pour toutes les unités.





## CHAPITRE II

### Débuter avec HYSYS

Ce chapitre constitue une familiarisation avec le logiciel HYSYS. Il explique en détail les étapes initiales nécessaires pour la réalisation de n'importe quelle simulation.

A la fin de ce chapitre, l'utilisateur sera en mesure de:

- Sélectionner les composés corrects (**components list**) et le modèle thermodynamique (**fluid package**) pour la réalisation d'une simulation donnée,
- Entrer et ré-entrer à l'environnement de simulation (**simulation environment**), et se familiariser avec la feuille de simulation (**simulation flowsheet**),
- Spécifier des courants de matière (**material streams**).

#### 1. Lancer HYSYS

Démarrer | HYSYS

La fenêtre de HYSYS s'affiche (Fig.II.1)

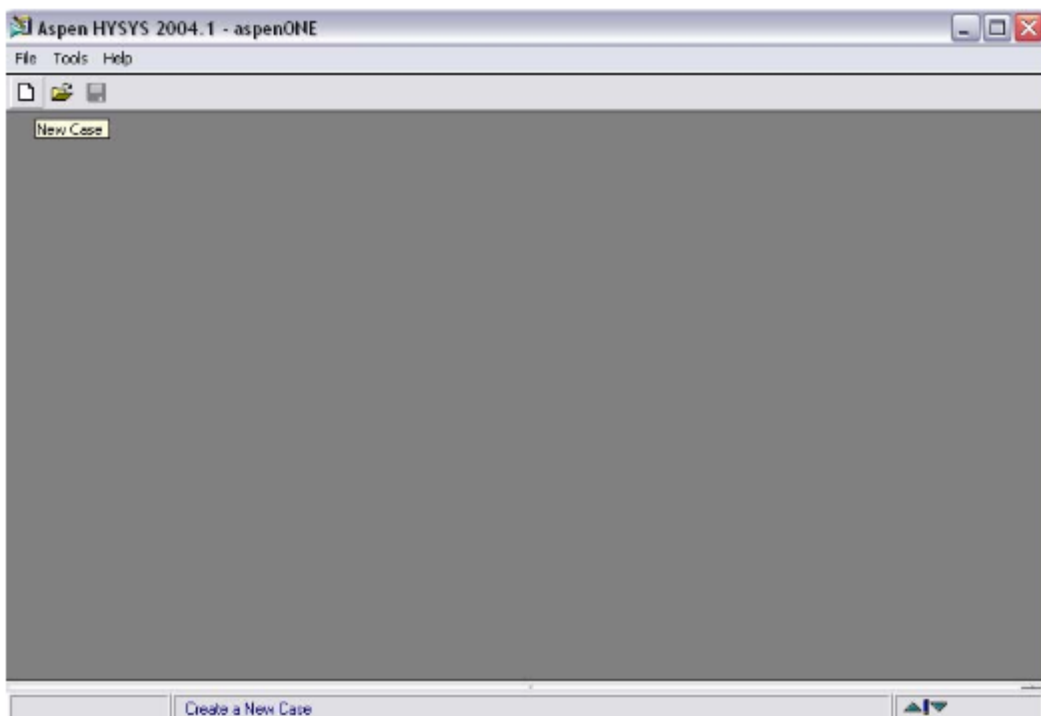


Fig.II.1

#### 2. Créer votre simulation

**File | New | Case** ou appuyez sur **Crtl+N** ou cliquer sur le bouton **New Case** 

En cliquant sur **New Case**, cela ouvrira **Simulation Basis Manager** (Fig.II.2), qui est l'endroit où tous les composés et leurs propriétés (**Fluid Package**) doivent être spécifiés.

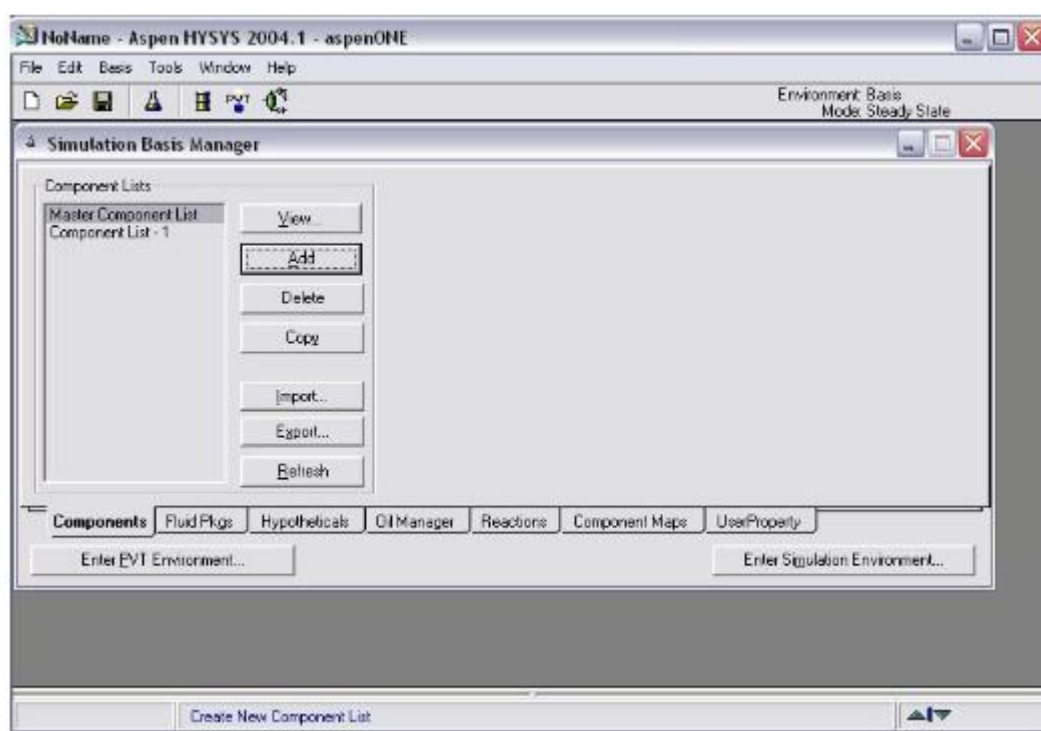


Fig.II.2

### 3. Enregistrer votre simulation

Avant de poursuivre, enregistrer votre fichier dans un endroit approprié : **File | Save as**

### 4. Insérer des composés à la simulation

Cliquer sur **Add** de la fenêtre **Simulation Basis Manager**, cela ouvrira **Component List View** (Fig.II.3) qui est la liste de tous les composés disponibles sur la bibliothèque de YHSIS.

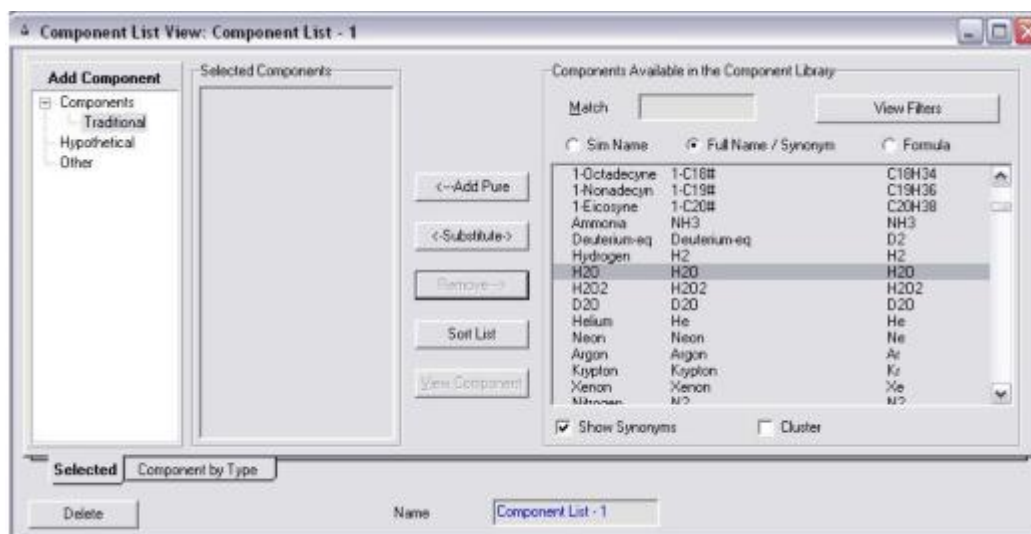


Fig.II.3

## 5. Sélectionner un modèle thermodynamique (Fluid Package)

A partir de **Simulation Basis Manager**, sélectionner le bouton **Fluid Package**, puis cliquer sur **Add** pour créer un nouveau **Fluid Package** (Fig.II.4).

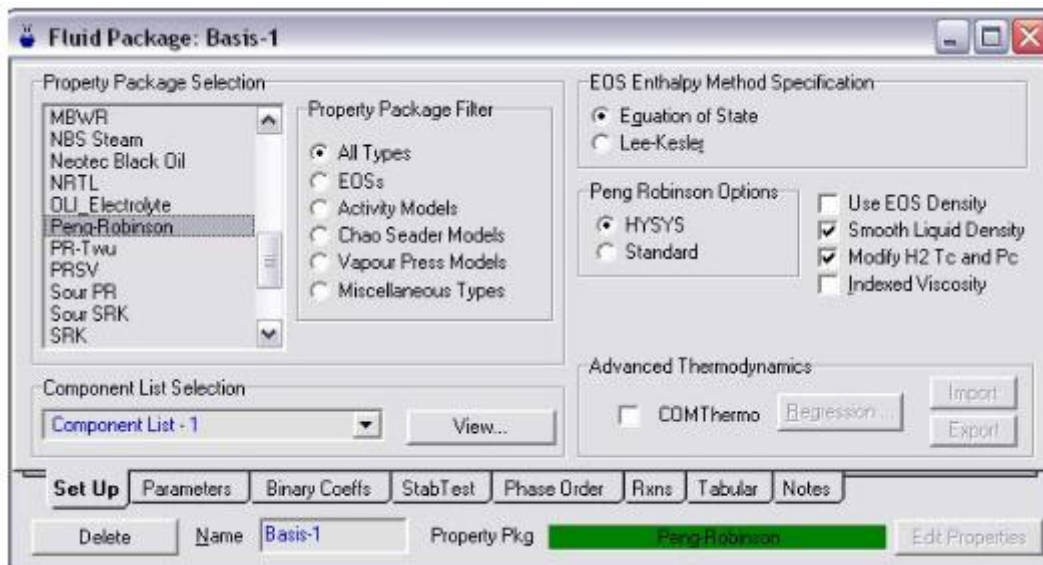


Fig.II.4

## 6. Entrer à l'environnement de simulation

Cliquer sur le bouton **Enter Simulation Environment** ou sur l'icône  pour commencer votre simulation

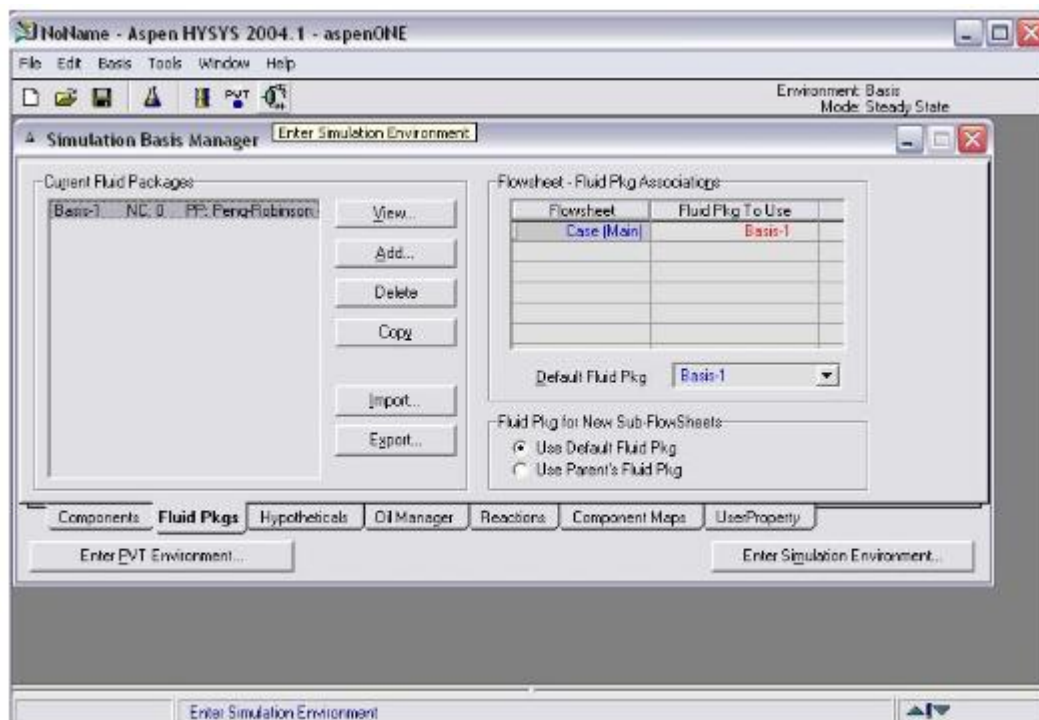


Fig.II.5

## 7. Travailler avec la feuille de simulation

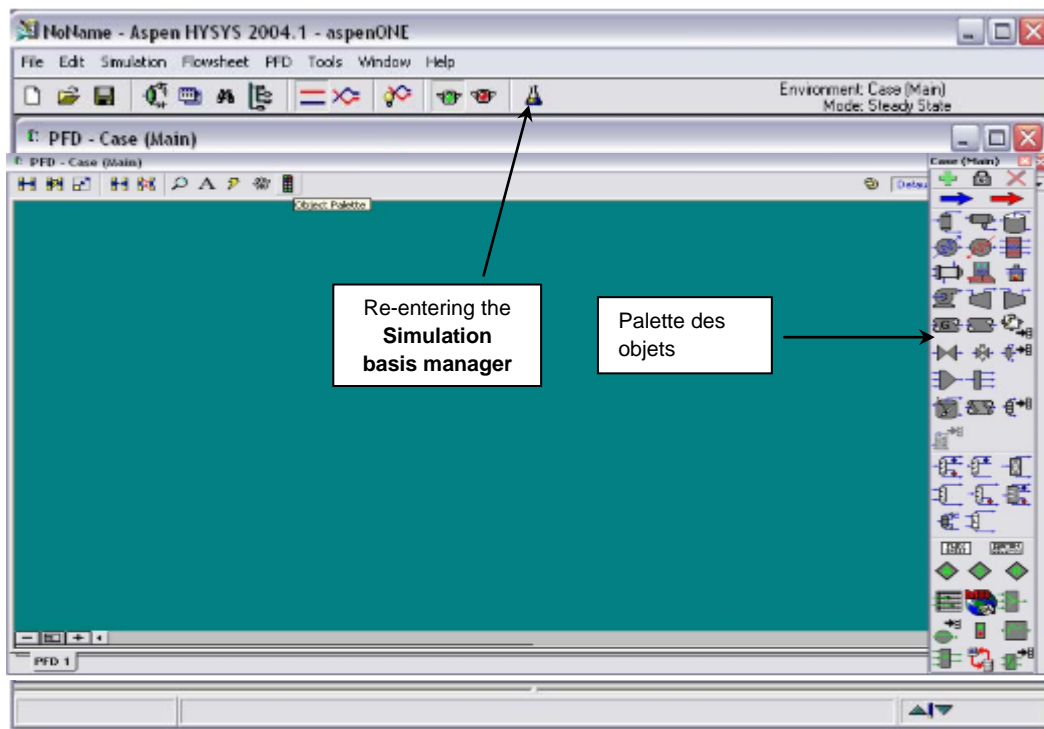




Fig.II.6

## 8. Ajouter un courant de matière (material stream)

Pour ajouter un **courant de matière**, cliquer sur la flèche bleue  de la palette des objets. La flèche rouge  est réservée pour un **courant d'énergie** (Energie Stream).

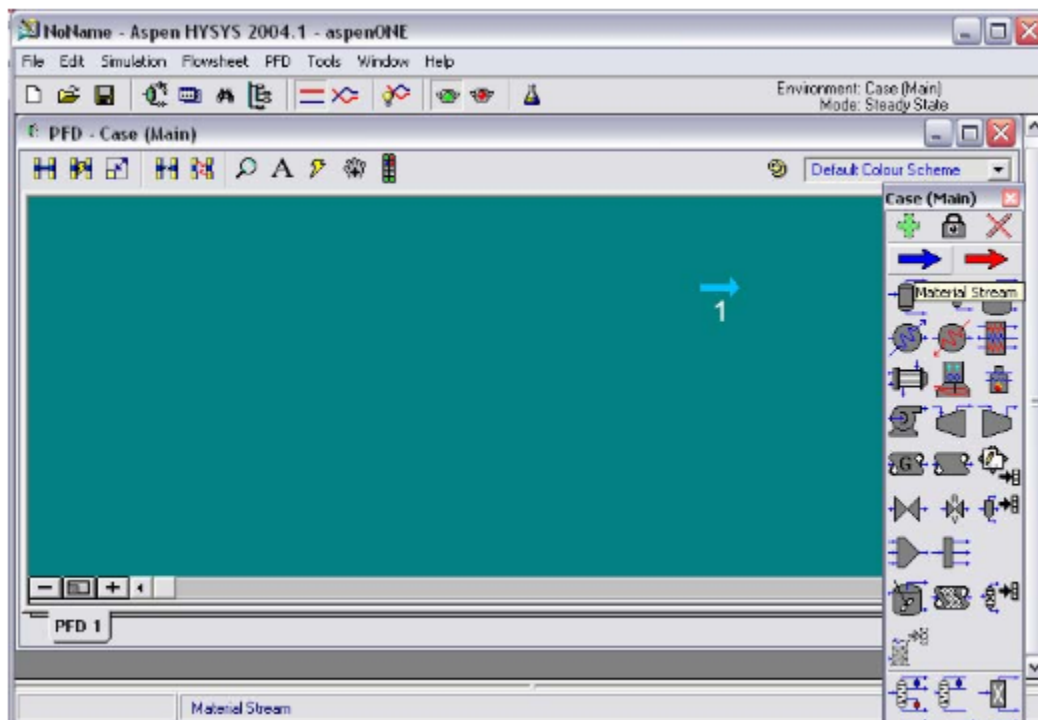


Fig.II.7

Pour entrer les informations d'un courant de matière déjà installé, double cliques sur la flèche, cela ouvrira la fenêtre suivante :



Fig.II.8

### Remarques :

- Au moins quatre variables sont nécessaires pour spécifier un courant de matière isolé : **la composition**, le **débit** et deux autres parmi la **température**, la **pression** ou la fraction de la phase vapeur (**Vapor/Phase Fraction**).
- Les valeurs indiquées en bleu sont spécifiés par l'utilisateur et peuvent être modifiées alors que les valeurs indiquées en noire sont calculées par HYSYS.



**Bleu foncé** : courant spécifié correctement et complètement résolu.

**Bleu claire** : courant incomplètement spécifié.

## Exercices

1. Créer un courant de matière qui contient uniquement de l'eau en utilisant les conditions suivantes :

- Fluid Package : Peng-Robinson
- Débit : 100 kgmole/f
- Pression : 1 atm
- Fraction de la phase vapeur : 100 %

*Quelle est la température de ce courant.*

**Réponse.** Température = .....

2. Répéter l'opération précédente toute en remplaçant la pression par une température de 150 °C.

*Quelle est la pression de ce courant.*

**Réponse.** Pression = .....

3. Avec les mêmes conditions que (2), réduire la température à 0 °C.

*Quelle est la nouvelle pression de ce courant.*

**Réponse.** Pression = .....

4. Créer un nouveau courant de matière qui contient uniquement de l'eau en utilisant les conditions suivantes :

- Fluid Package : Peng-Robinson
- Débit : 100 kgmole/f
- Pression : 2 atm
- Fraction de la phase vapeur : 100 %

*Quelle est la température de ce courant.*

**Réponse.** Température = .....

5. Avec les mêmes conditions que (4), augmenter la pression à 5 atm.

*Quelle est la nouvelle température de ce courant.*

**Réponse.** température = .....

6. Avec les mêmes conditions que (4), réduire la pression à 0.5 atm.

*Quelle est la nouvelle température de ce courant.*

**Réponse.** température = .....

7. Que pouvez-vous conclure de ces problèmes (1-6)?

**Réponse :** -----  
-----  
-----





## CHAPITRE III

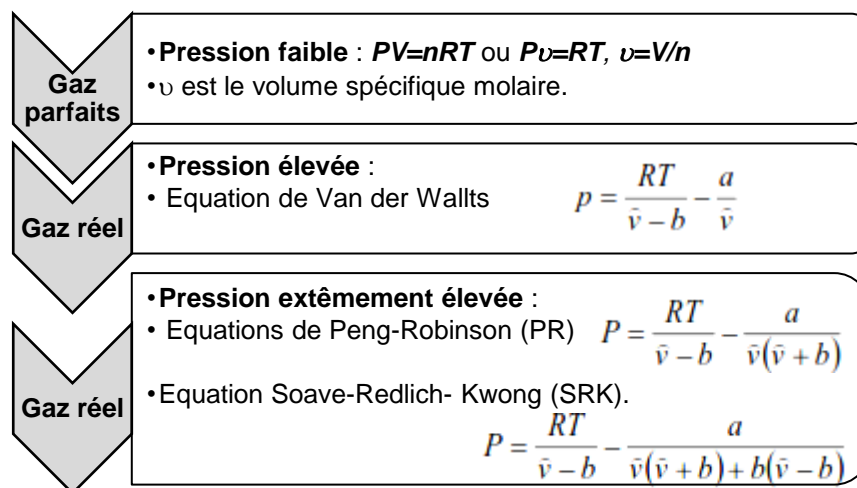
### Equations d'Etat

La résolution des équations d'état permet de déterminer le **volume spécifique** d'un mélange gazeux à une température et pression spécifiées. Sans utiliser les équations d'état, il serait pratiquement impossible de dimensionner une installation chimique. En connaissant ce volume spécifique, on peut déterminer les dimensions, et donc, le coût de cette installation chimique.

A la fin de ce chapitre, l'utilisateur sera en mesure de :

- Déterminer le volume spécifique d'un composé pur ou d'un mélange gazeux avec HYSYS,
- Comparer les résultats obtenus avec différentes équations d'état,
- Visualiser le résultat en utilisant **Workbook**,
- Analyser la propriété en utilisant **Case Studies**.

#### 1. Equations d'état : Formulations mathématiques



Les équations de Peng-Robinson (PR) et Soave-Redlich-Kwong (SRK) génèrent de manière directe toutes les propriétés d'équilibres thermodynamiques. Parmi ceux-ci, **l'équation de Peng-Robinson (PR) soutient la plus large gamme de conditions opératoires et la plus grande variété de systèmes**. Elle est utilisée couramment pour les hydrocarbures.

#### 2. Construire votre simulation

**Problème** : Trouver le volume spécifique molaire de n-butane à 500 K et 18 atm en utilisant les équations d'état de PR et SRK.

- Lancer HYSYS,
- Créer une nouvelle simulation « **New Case** »,
- Définir la base de simulation « **Simulation basis Manager** » :
  - Components** : n-butane
  - Fluid Package** : Soave-Redlich-Kwong (SRK)
- Installer un courant de matière (**material stream**) avec les spécifications suivantes :
  - Temperature 500 K, Pressure 18 atm, composants n-butane (100%), Molar flow 100 kmole/h.

- Visualiser les Résultats avec **Workbook**  
**Tools** menu | **Workbooks** → Fig.III.1 | **View** → Fig.III.2



Fig.III.1

The screenshot shows the 'Workbook - Case (Main)' window. It contains a table with the following data:

Name	Value	Unit
Vapour Fraction	1.0000	
Temperature [C]	226.9	
Pressure [kPa]	1824	
Molar Flow [kgmole/h]	100.0	
Mass Flow [kg/h]	5812	
Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	9.966	
Heat Flow [kJ/h]	-1.027e+007	
Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	-1.027e+005	

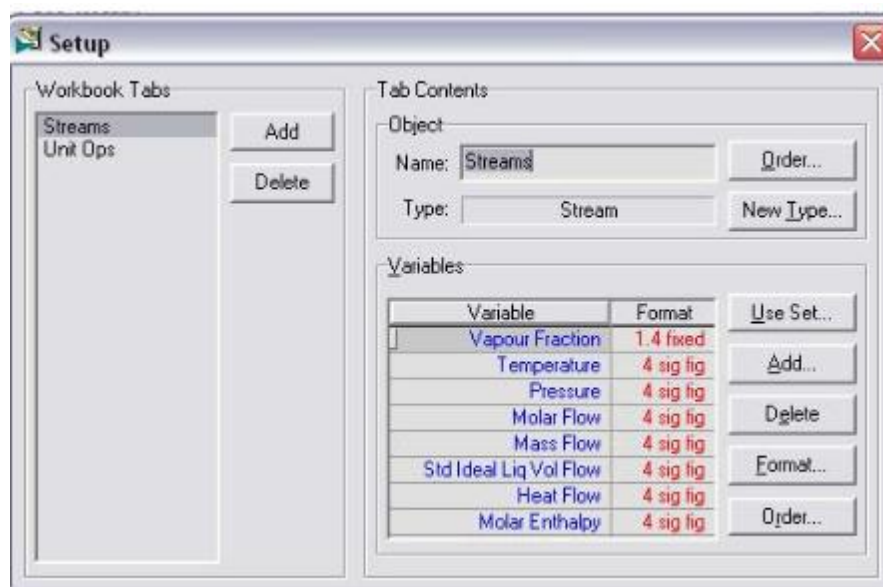
Below the table, there are tabs for 'Streams' and 'Unit Ops'. The 'Streams' tab is selected, showing a list of streams: 'ProductBlock\_1' and 'FeederBlock\_1'. There are also checkboxes for 'Include Sub-Flowsheets' and 'Show Name Only', and a 'Number of Hidden Objects' field set to 0.

Fig.III.2

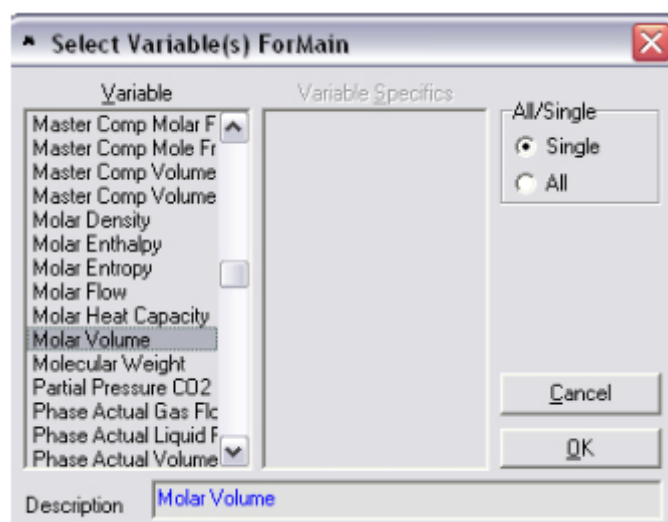
- Pour afficher le Volume molaire (**Molar Volume**) sur **Workbook** :  
**Workbooks** menu | **Setup** → Fig.III.3 | **Add** → Fig.III.4 | **Molar volume/OK** → Fig.III.3

Quelle est le volume molaire de n-butane ?  
 Réponse :-----

- Analyser la propriété avec **Case Studies**.  
**Tools** menu | **Databooks** → Fig.III.6 | Object: stream 1/OK → Fig.III.7 | **Molar volume/OK** [Répéter la dernière étape (→ Fig.III.7 | **Temperature/OK**) pour insérer la température] → Fig.III.8 | **Insert** → Fig.III.9 | **Case studies/View** → Fig.III.10 (Spécifier les bornes de température et le pas) | **Start** → Fig.III.11.



**Fig.III.3**



**Fig.III.4**

**Workbook - Case (Main)**

Name	1	New			
Vapour Fraction	1.0000				
Temperature [C]	226.9				
Pressure [kPa]	1824				
Molar Flow [kgmole/h]	100.0				
Mass Flow [kg/h]	5812				
Std Ideal Liq Vol Flow [m <sup>3</sup> /h]	9.966				
Heat Flow [kJ/h]	-1.027e+007				
Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	-1.027e+006				
Molar Volume [m <sup>3</sup> /kgmole]	2.058				

---

**Streams**   Unit Ops

ProductBlock\_1  
 FeederBlock\_1

Fluid Pkg **Air**  
  
☐ Include Sub-Flowsheets  
☐ Show Name Only  
 Number of Hidden Objects: 0

☒ Horizontal Matrix

**Fig.III.5**

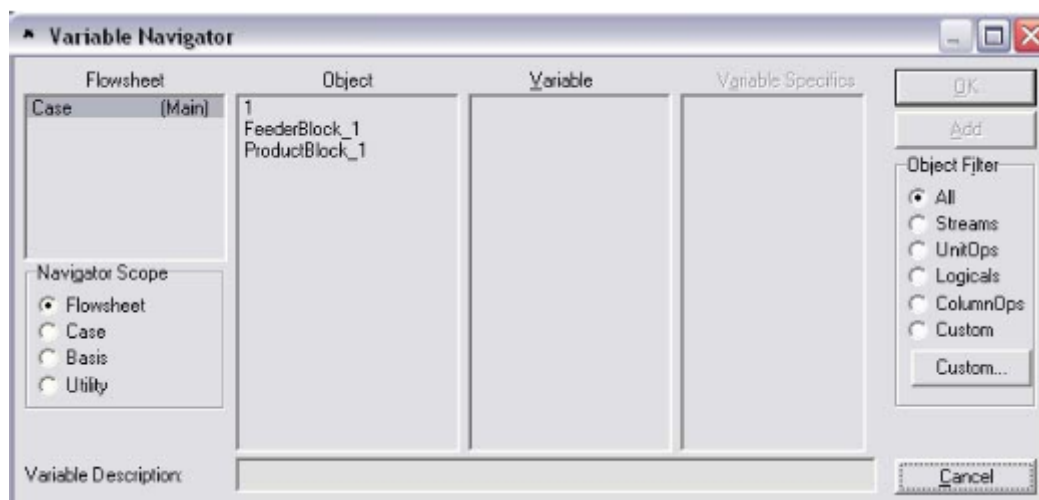


Fig.III.6

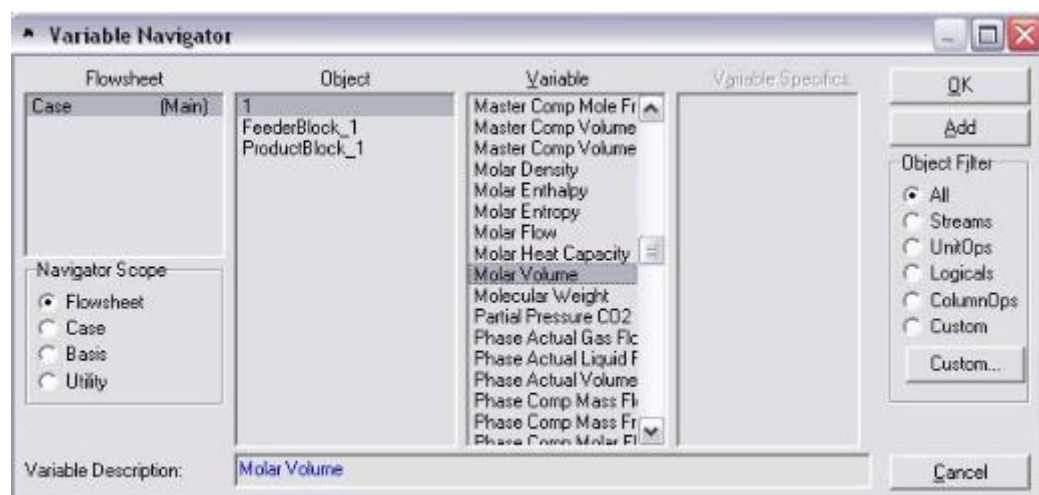


Fig.III.7

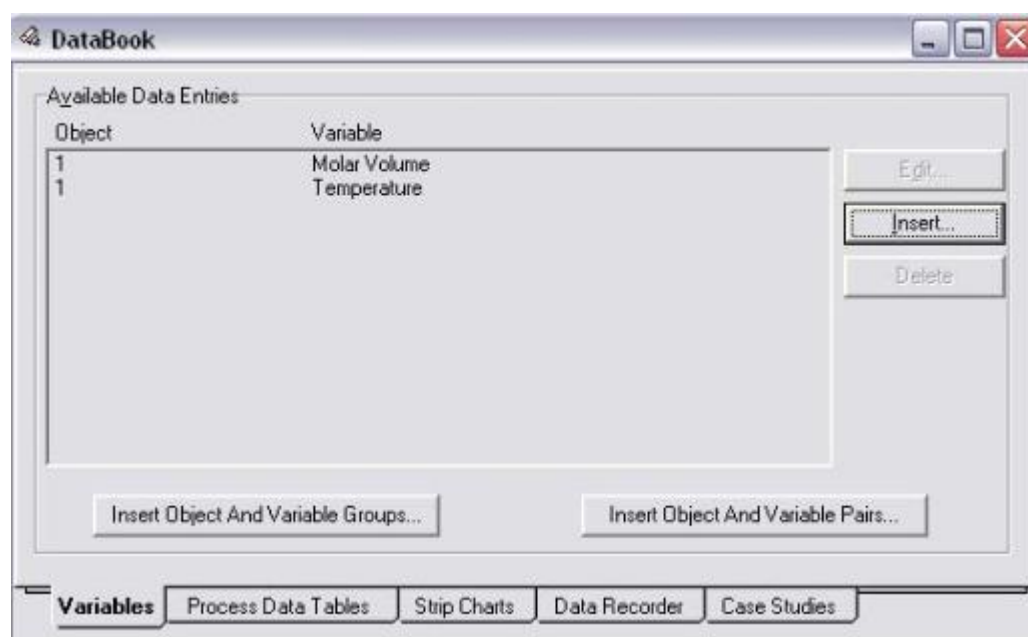


Fig.III.8

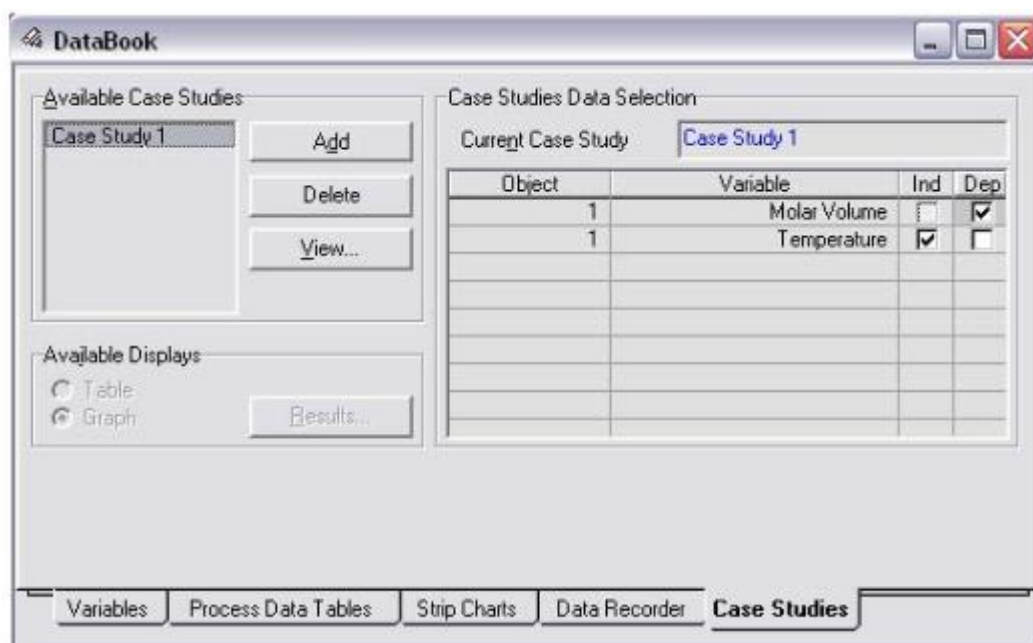


Fig.III.9

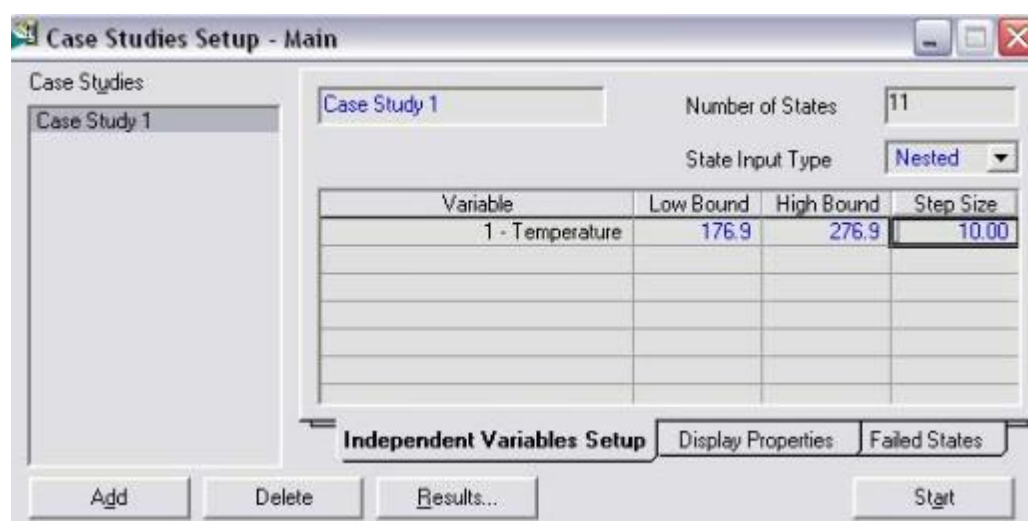


Fig.III.10

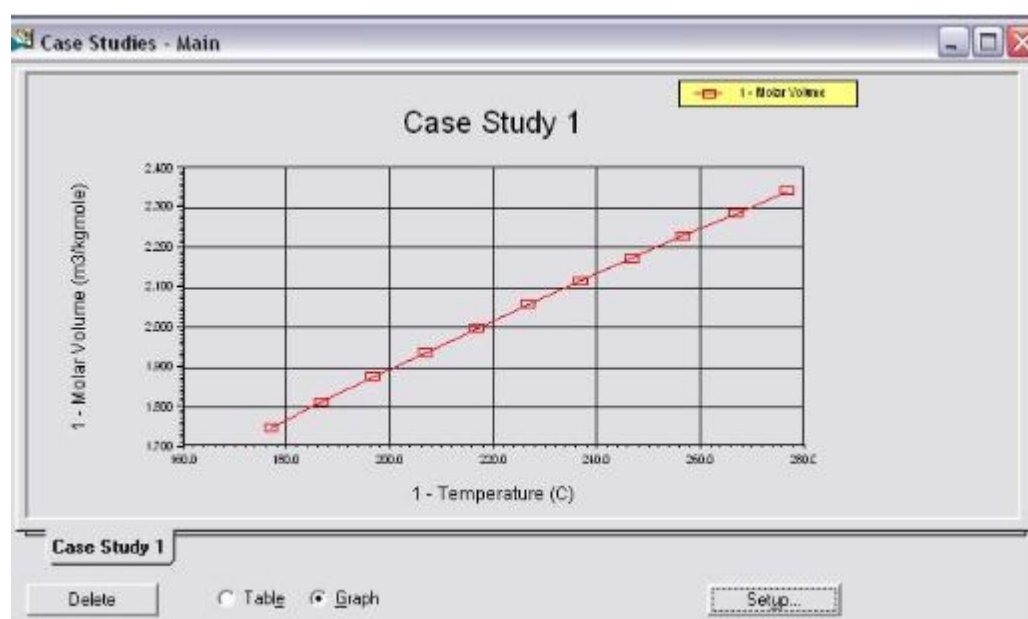


Fig.III.11

Que pouvez-vous conclure à partir de la Figure III.11 ?

**Réponse :**-----  
-----

- Changer le modèle thermodynamique (**Fluid Package**) en utilisant l'équation de **PR** cette fois-ci.

Comparer les résultats obtenus par les deux **Fluids Packages**, SRK et PR

**Réponse :**-----  
-----  
-----

## Exercices

1. Trouver le volume molaire de l'ammoniac  $\text{NH}_3$  à 56 atm et 450 K en utilisant l'équation d'état de SRK.
2. Trouver le volume molaire d u méthanol (gaz) à 100 atm et 300 °C en utilisant l'équation d'état de PR. Comparer le résultat avec celui obtenu si on remplaçant l'équation d'état de PR par celle de SRK.
3. On considère un mélange gazeux de 25 %  $\text{NH}_3$  et le reste  $\text{H}_2$  et  $\text{N}_2$  avec un rapport de 1:3. Le gaz est à 270 atm et 550 K. Estimer le volume molaire de ce mélange gazeux en utilisant l'équation d'état de.
4. On considère un mélange gazeux de CO : 100 kmole/h,  $\text{H}_2$  : 200 kmole/h, méthanol : 100 kmole/h. Le gaz est à 100 atm et 300 °C. Calculer le volume molaire de ce mélange gazeux en utilisant l'équation d'état de PR et le comparer celui calculer par l'équation d'état de SRK.





## CHAPITRE IV

# Pompe, Compresseur et Détendeur

**Ce** chapitre commence par un problème de trouver quelques paramètres de fonctionnement de trois opérations unitaires, qui sont, le pompage des liquides, la compression et la détente des gaz.

A la fin de ce chapitre, l'utilisateur sera en mesure de :

- Fonctionner avec HYSYS des opérations de pompage d'un liquide, de compression et de détente d'un gaz,
- Connecter des courants de matières aux opérations unitaires,
- Déterminer quelques paramètres de fonctionnement des opérations unitaires étudiées.

### 1. Pompe

La pompe est utilisée pour augmenter la pression d'un **liquide**. Selon les informations spécifiées, HYSYS calcule soit une pression inconnue, soit une température inconnue ou l'efficacité de la pompe.

**Problème** : De l'eau à 120 °C et 3 bars alimente une pompe d'efficacité de 10 % avec un flux molaire de 100 kmole/h. On désire augmenter la pression à 84 bars. On utilisant l'équation de PR comme un Fluid Package, déterminer la température de l'eau à la sortie de la pompe.

#### Étapes à suivre

- Lancer HYSYS,
- Créer une nouvelle simulation « **New Case** »,
- Définir la base de simulation « **Simulation basis Manager** » :  

**Components** : eau  
**Fluid Package** Peng-Robinson (PR)
- Installer deux courants de matière (**material stream**) avec les spécifications suivantes :  

Courant d'entrée: Nom : Feed, Temperature 120 °C, Pressure 3 bars, composition H<sub>2</sub>O-100%, Molar flow 100 kgmole/h.  
 Courant de sortie: Nom : Outlet, Pressure 84 bars,
- Installer une pompe à partir de la palette des objets →Fig.IV.1,
- Connecter la pompe aux courants de matières, comme suit :  
 Double cliques sur la pompe P-100, cela ouvrira la fenêtre de la Fig. IV.2.
- Dans **inlet**, faites défiler vers le bas pour sélectionner *Feed* et *Outlet* dans **Outlet** comme indiqué sur Fig.IV.3,
- Créer un courant d'énergie pour la pompe, comme suit :  
 Cliquer sur l'espace de **Energy** et taper *Work* comme indiqué sur la figure Fig.IV.4.
- Spécifier l'efficacité de la pompe :  
 L'efficacité de la pompe est par défaut 75%. Pour changer l'efficacité, procéder comme suit :  
**Design | Parameters**→Fig.IV.5 | Dans la case **Adiabatic efficiency** Changer 75% par 10 %,
- Après avoir changé l'efficacité, cliquer sur l'onglet **Worksheet** pour visualiser les résultats comme le montre la Fig. 6.

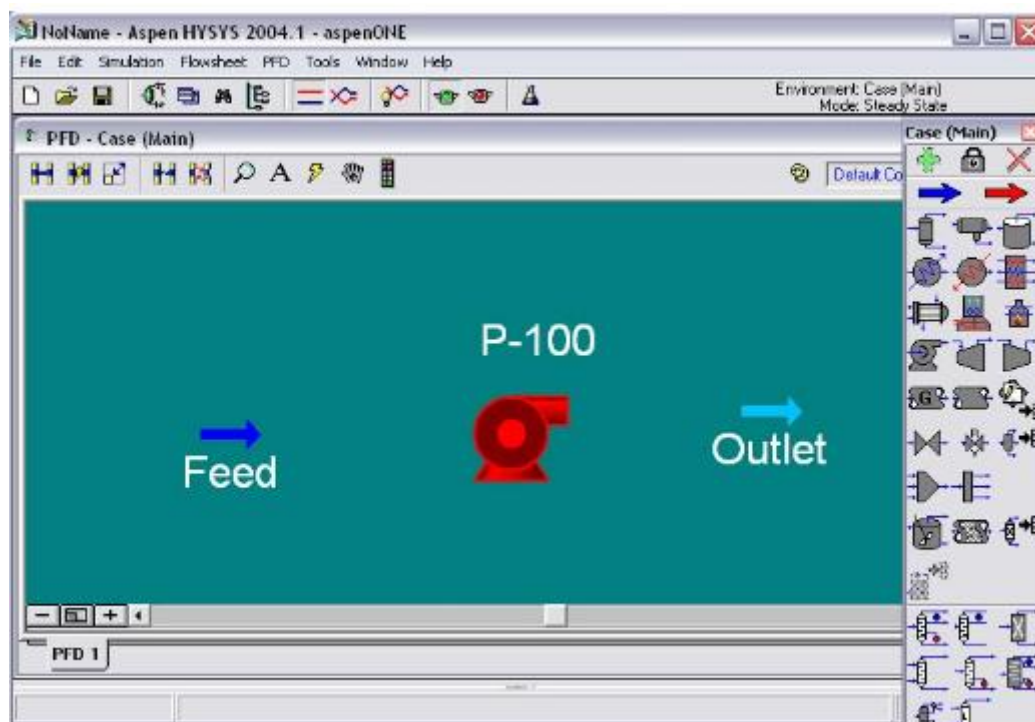


Fig.IV.1

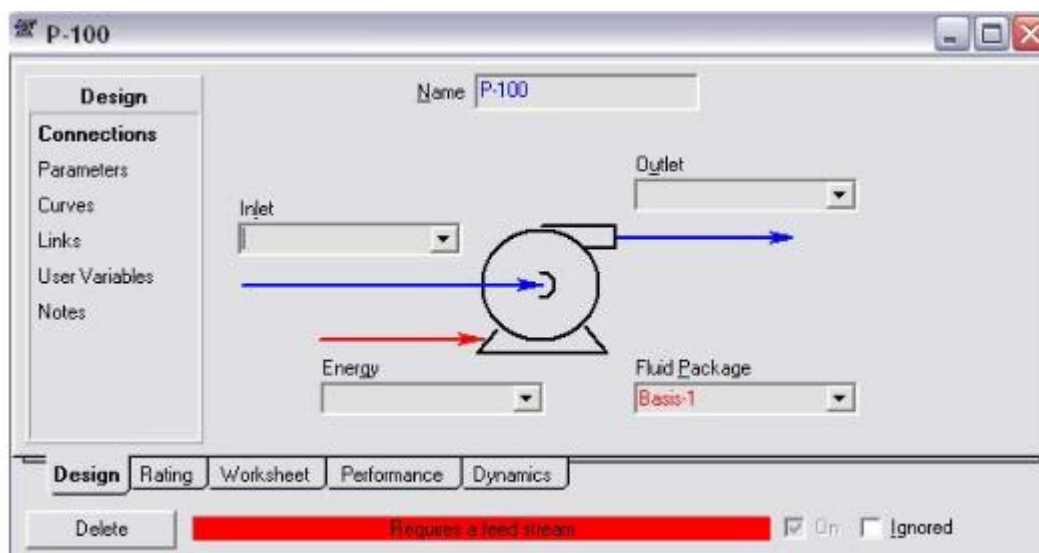


Fig.IV.2

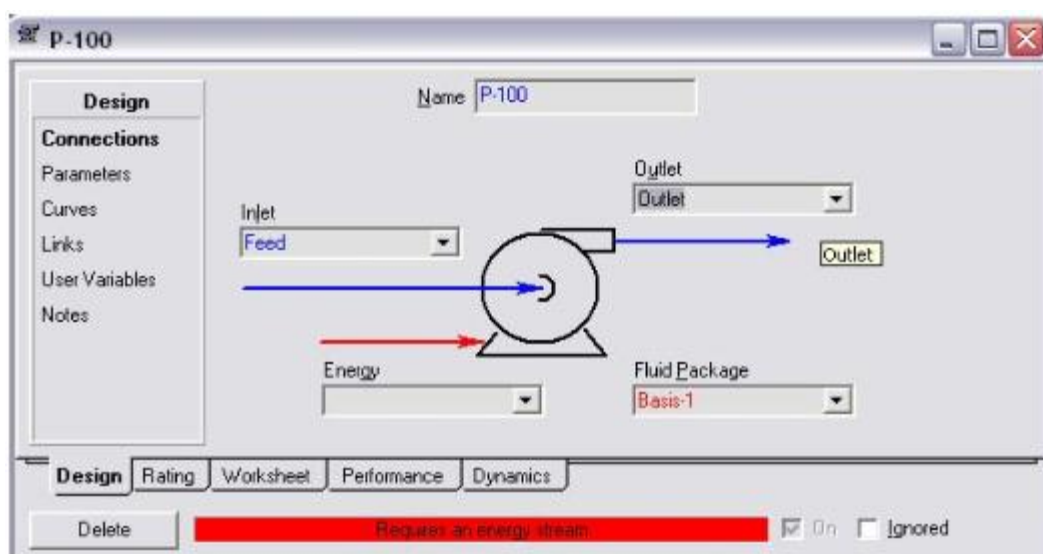


Fig.IV.3

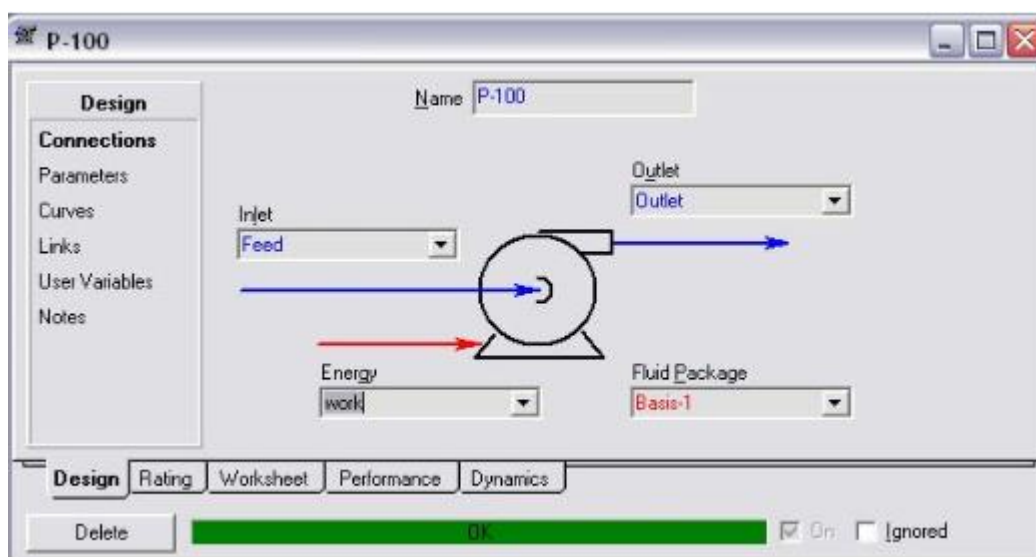


Fig.IV.4

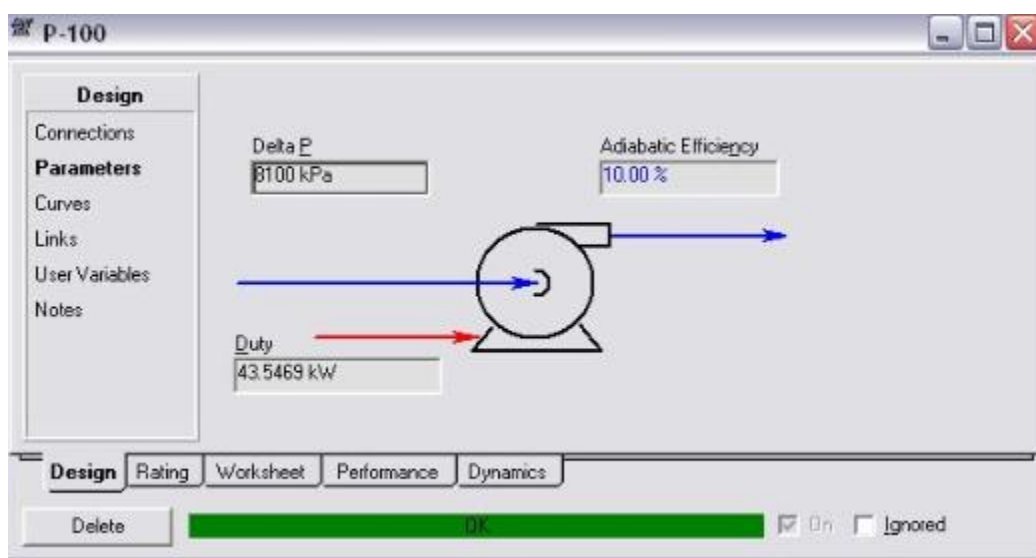


Fig.IV.5

Name	Feed	Outlet	work
Vapour	0.0000	0.0000	<empty>
Temperature [C]	120.0	138.1	<empty>
Pressure [bar]	3.000	84.00	<empty>
Molar Flow [kgmole/h]	100.0	100.0	<empty>
Mass Flow [kg/h]	1802	1802	<empty>
Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	1.805	1.805	<empty>
Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	-2.779e+005	-2.764e+005	<empty>
Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	75.40	78.83	<empty>
Heat Flow [kJ/h]	-2.779e+007	-2.764e+007	1.568e+005

Fig.IV.6

Quelle est la température de l'eau à la sortie de la pompe ?  
Réponse : -----

## 2. Compresseur

Le compresseur est utilisé pour augmenter la pression d'un **gaz**. Selon les informations spécifiées, HYSYS calcule soit une propriété du courant (température ou pression) soit l'efficacité de compression.

**Exemple d'application :** Un mélange de gaz (33%-C<sub>1</sub>, 14,3%-C<sub>2</sub>, 10,1%-C<sub>3</sub>, 9,8%-i-C<sub>4</sub>, 5,9%-n-C<sub>5</sub>, 6,9%-i-C<sub>6</sub>, 7,8%-n-C<sub>6</sub>, 4,2%-C<sub>7</sub><sup>+</sup>) à 100 °C et 1 bar entre un compresseur d'efficacité de 30 % avec un flux molaire de 100 kmole/h et sort avec une pression de 5 bars. On utilisant l'équation de PR comme un Fluid Package, déterminer la température du gaz à la sortie du compresseur.

Dans le cas d'un compresseur, les mêmes étapes que celles d'une pompe sont à suivre pour simuler l'opération de compression sauf qu'il y a une étape supplémentaire concernant la création d'un nouveau composé, C<sub>7</sub><sup>+</sup>, qui n'existe pas dans la bibliothèque de composés. Ce composé doit être défini en tant que composé Hypothétique (**Hypothetical**), comme suit :

- Après avoir entré les composés C<sub>1</sub> à n-C<sub>6</sub> à la liste des composés (Fig. IV.7.), cliquer sur l'icone **Hypothetical** pour ajouter le C<sub>7</sub><sup>+</sup>.
- Cliquer sur **Quick Creat a Hypo component**, cela affichera la fenêtre de la Fig. 8,
- Cliquer sur l'anglet **ID** puis entrer le nom de composé (voir Fig. 8),
- Sélectionner l'onglet **Critical**. Cela affichra la Figure 9. La seule propriété qu'on sait concernant C<sub>7</sub><sup>+</sup> est le point d'ébullition normal (**Normal Boiling Pt**), 110°C. Entrer cette température et puis cliquer sur **Estimate Unknown Props**, pour estimer les toutes autres propriétés de C<sub>7</sub><sup>+</sup>.
- Cliquer sur **Edit Properties** pour ajouter ce composé à la liste des composés. Cela affichera la Fig. 10.
- Sélectionner le **Fluid Package** et puis continuer les autres étapes.

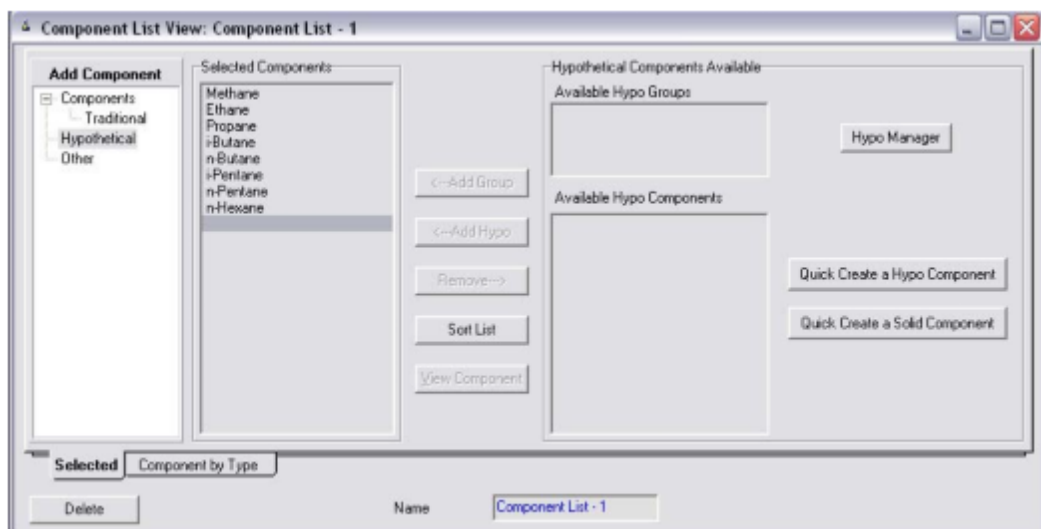
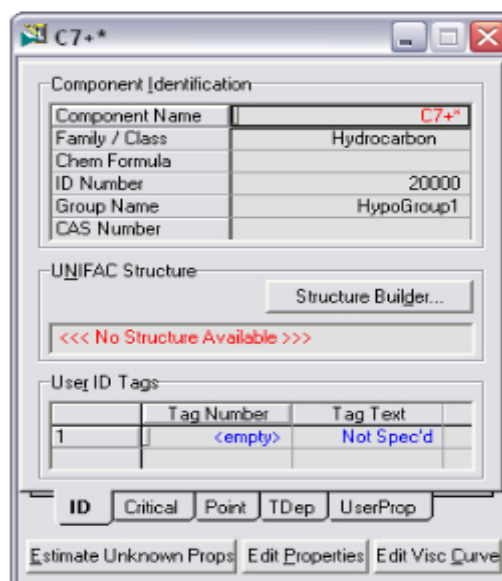


Fig.IV.7



**Component Identification**

Component Name	C7+*
Family / Class	Hydrocarbon
Chem Formula	
ID Number	20000
Group Name	HypoGroup1
CAS Number	

UNIFAC Structure Structure Builder...

<<< No Structure Available >>>

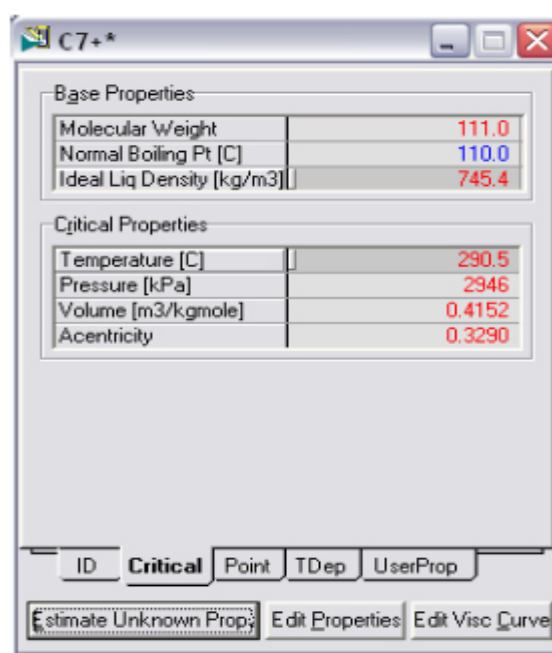
User ID Tags

	Tag Number	Tag Text
1	<empty>	Not Spec'd

ID Critical Point TDep UserProp

Estimate Unknown Props Edit Properties Edit Visc Curve

Fig.IV.8



**Base Properties**

Molecular Weight	111.0
Normal Boiling Pt [C]	110.0
Ideal Liq Density [kg/m3]	745.4

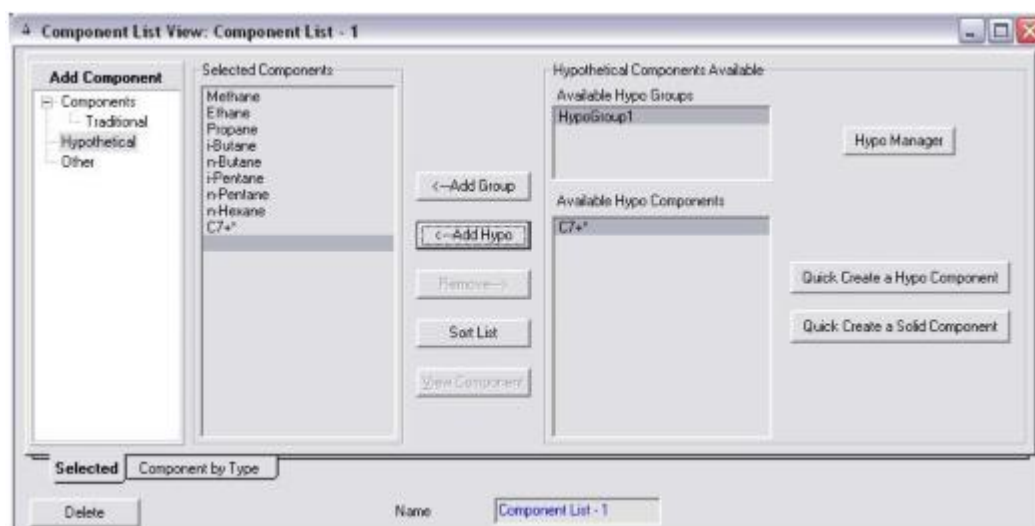
**Critical Properties**

Temperature [C]	290.5
Pressure [kPa]	2946
Volume [m3/kgmole]	0.4152
Acentricity	0.3290

ID Critical Point TDep UserProp

Estimate Unknown Props Edit Properties Edit Visc Curve

Fig.IV.9



**Component List View: Component List - 1**

**Add Component**

- Components
  - Traditional
  - Hypothetical
  - Other

**Selected Components**

- Methane
- Ethane
- Propane
- i-Butane
- n-Butane
- i-Pentane
- n-Pentane
- n-Hexane
- C7+\*

<--Add Group  
 <--Add Hypo  
 Remove-->  
 Sort List  
 View Component

**Hypothetical Components Available**

Available Hypo Groups

- HypoGroup1

Hypo Manager

Available Hypo Components

- C7+\*

Quick Create a Hypo Component  
 Quick Create a Solid Component

Selected Component by Type

Delete

Name: Component List - 1

Fig.IV.10

Quelle est la température du gaz à la sortie du compresseur?

Réponse : -----

### 3. Détendeur (Expander)

L'expander est utilisé pour diminuer la pression d'un **gaz** (opération inverse de la compression). Selon les informations spécifiées, HYSYS calcule soit une propriété de courant soit l'efficacité d'expansion. Le calcul d'un expander est effectué de la même façon que celui d'un compresseur.

**Exemple d'application :** Un mélange de gaz naturel (50%-C<sub>1</sub>, 30%-C<sub>2</sub>, 20%-C<sub>3</sub>) à 25 °C et 20 bars entre un expander d'efficacité de 30 % avec un flux molaire de 100 kmole/h et sort avec une pression de 5 bars. On utilisant l'équation de PR comme un Fluid Package, déterminer la température du gaz à la sortie de l'expander.

Quelle est la température du gaz à la sortie de l'expander?

Réponse : -----





## CHAPITRE V

# Echangeur de chaleur & Séparateur flash

Ce chapitre commence par un problème de trouver quelques paramètres de fonctionnement de deux opérations unitaires, qui sont, l'échangeur de chaleur et le séparateur flash.

A la fin de ce chapitre, l'utilisateur sera en mesure de :

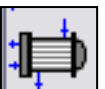
- Opérer avec HYSYS un échangeur de chaleur et un séparateur afin de modéliser les processus de transfert de chaleur et de séparation de phases.

### 1. Echangeur de chaleur

**Exemple d'application** : Une eau chaude à 250 °C et 1000 psig est utilisée pour chauffer une eau froide dans un échangeur à faisceau et calandre. La température et la pression de l'eau froide entrante est 25 °C et 130 psig, respectivement. Les températures de l'eau chaude et de l'eau froide à la sortie sont 150 °C et 190 °C, respectivement. Si le flux du courant chaud est 100 kmole/h, déterminer le flux du courant froid traversant l'échangeur et quelle est la quantité de chaleur transférée entre les deux fluides?

#### Etapes à suivre

- Lancer HYSYS,
- Créer une nouvelle simulation « **New Case** »,
- Définir la base de simulation « **Simulation basis Manager** » :  
**Components** : eau  
**Fluid Package** Peng-Robinson (PR)
- Installer deux courants d'alimentant de l'échangeur avec les spécifications suivantes :  
 Courant 1: Nom : *Tube in*, Temperature 1250 °C, Pressure 1000 psig, composition H<sub>2</sub>O-100%, Molar flow 100 kmole/h.  
 Courant 2: Nom : *shell in*, Temperature 25 °C, Pressure 130 psig, composition H<sub>2</sub>O-100%.
- Insérer un échangeur de chaleur multitubulaire à partir de la palette des objets,
- Double-clic sur l'échangeur, cela ouvrira la fenêtre de la Figure V.1.,
- Connecter les courants d'alimentation à l'échangeur comme indiqué sur la Figure V.1,
- Passer à la page **Parameters**. Compléter la page come l'indique la Figure V.2,
- Aller à l'onglet **Worksheet**. Dans la page **Conditions**, compléter les informations manquantes comme le montre la Figure V.3.



Icône de l'échangeur de chaleur

*Quelle est le flux de matière du courant froid et la quantité de chaleur échangée entre les deux fluides*

Réponse : ----Flux = -----

----Quantité chaleur = -----

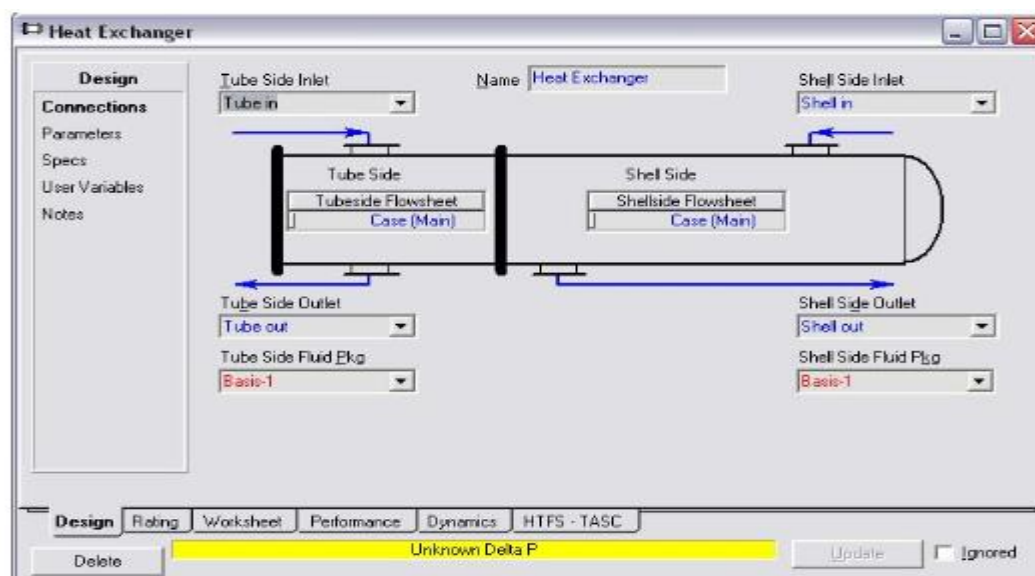


Fig.V.1

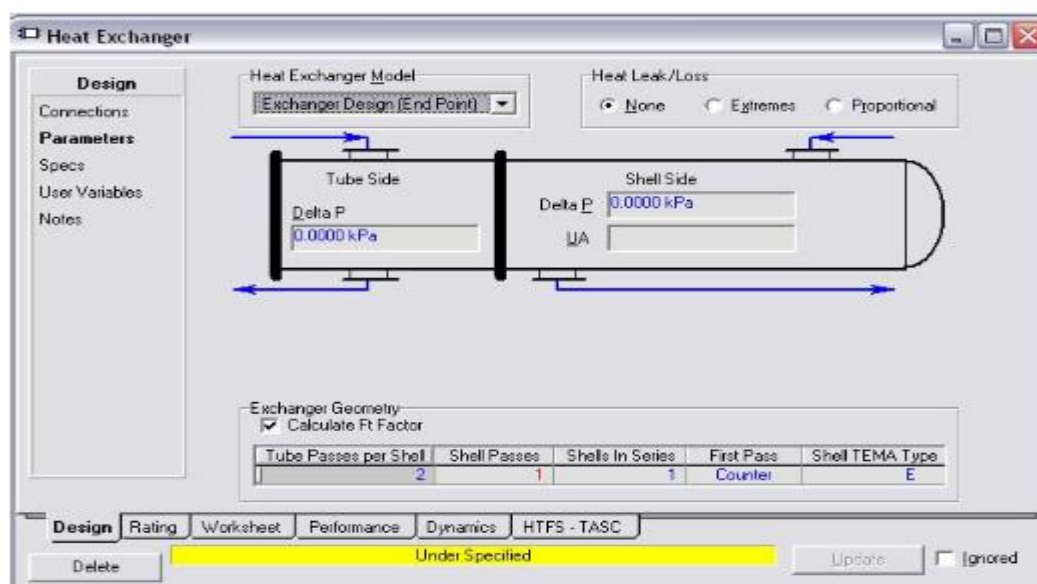


Fig.V.2

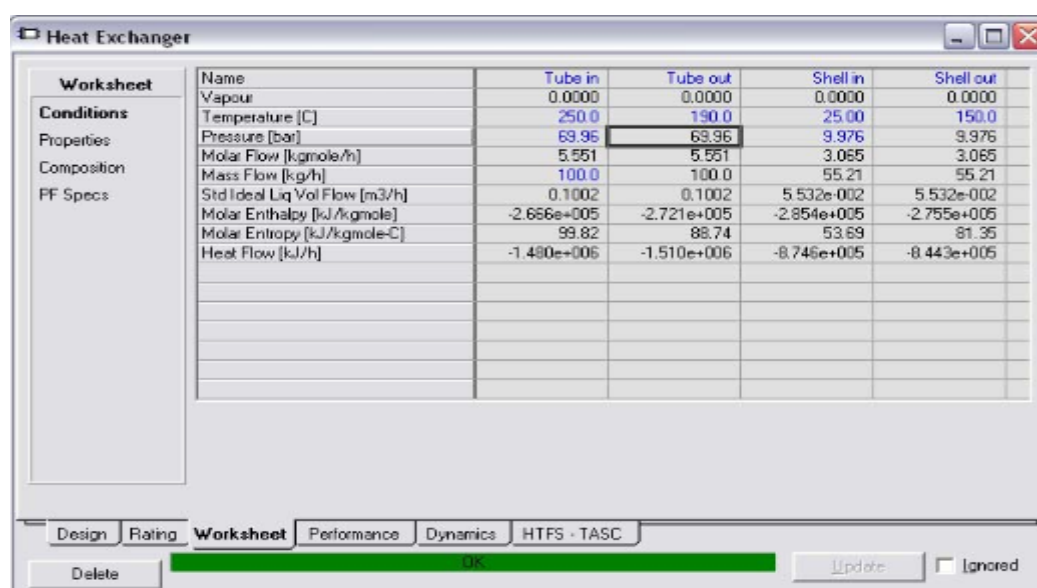


Fig.V.3

## 2. Séparateur Flash (Separator)

Une séparation flash est utilisée pour diviser le contenu d'un courant (mélange liquide-vapeur) en sa phase vapeur et sa phase liquide. En régime stationnaire, la vapeur et le liquide dans le récipient sont autorisés à atteindre l'équilibre, avant qu'ils ne soient séparés. En HYSYS, un séparateur flash est utilisé pour déterminer les conditions des produits et des phases de la séparation (flux, compositions,...).

**Exemple d'application :** Soit un courant de matière contenant 15% éthane, 20% propane, 60% i-butane et 5% n-butane de température 50 °F, pression 1 atm et d'un flux molaire 100 kmole/h. Ce flux est à comprimer à 50 psig et ensuite refroidi à 32 °F. La vapeur et le liquide résultants sont à séparer en deux courants, liquide et vapeur. Quelle est le flux et la composition de chacun des courants résultants.

### Etapes à suivre

- Lancer HYSYS,
- Créer une nouvelle simulation « **New Case** »,
- Définir la base de simulation « **Simulation basis Manager** » :  
**Components** : éthane, propane, i-butane, n-butane  
**Fluid Package** Peng-Robinson (PR)
- Installer un courant d'alimentant avec les spécifications suivantes :  
 Courant: Nom : Gaz, Temperature 50 °F, Pressure 1 atm, Molar flow 100 kgmole/h, composition 15%-éthane, 20%-propane, 60%-i-butane et 5%-n-butane,.
- Insérer un compresseur à partir de la palette des objets,
- Double-clic sur le compresseur et entrer les informations indiquées sur la Figure V.4,
- Aller à l'onglet **Worksheet**. Dans la page **Conditions**, compléter les informations manquantes comme le montre la Figure V.5.
- Insérer un échangeur simple (**Cooler**) à partir de la palette des objets,
- Dans la page **Connections**, entrer les informations indiquées sur la Figure V. 6,
- Passer à la page **Parameters** et compléter la page comme le montre la Figure V. 7,
- Aller à l'onglet **Worksheet**. Dans la page **Conditions**, compléter les informations manquantes comme le montre la Figure V.8,
- Insérer un séparateur (**separator**) à partir de la palette des objets,
- Double-clic sur le séparateur et entrer les informations indiquées sur la Figure V.9,
- Aller à l'onglet **Worksheet** pour visualiser les résultats → Figures 10 et 11.

Quelle est le flux et la composition de chacun des courants résultants.

<b>Réponse :</b>	<b>Courant</b>	<b>Top</b>	<b>Bottom</b>
Flux		-----	-----
Composition	Ethane	-----	-----
	Propane	-----	-----
	i-Butane	-----	-----
	n-Butane	-----	-----

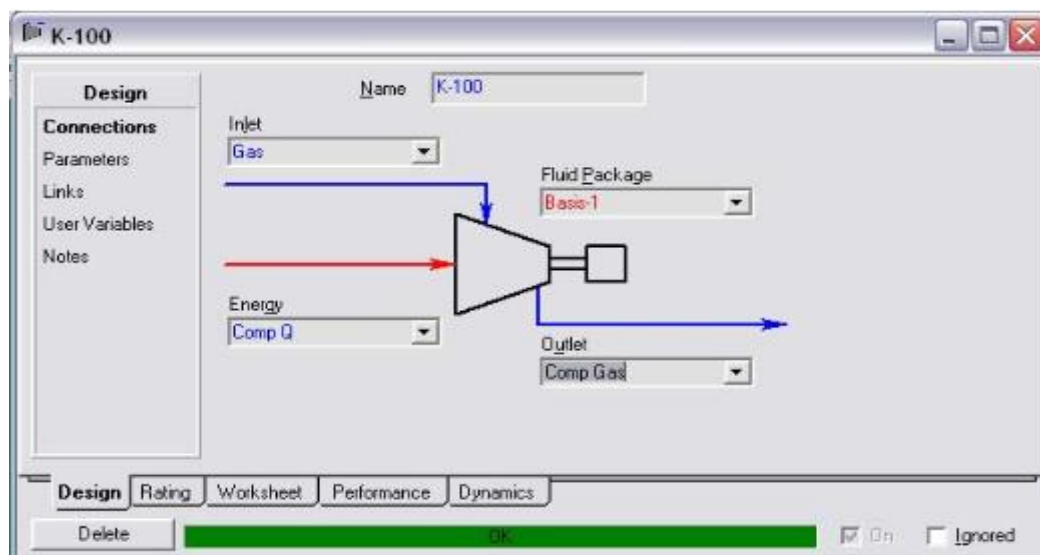


Fig.V.4

The screenshot shows the 'Worksheet' window for the 'K-100' unit. It displays a table of properties for the inlet 'Gas', the outlet 'Comp Gas', and the energy stream 'Comp Q'.

	Gas	Comp Gas	Comp Q
Name	Gas	Comp Gas	Comp Q
Vapour	1.0000	1.0000	<empty>
Temperature [C]	10.00	57.59	<empty>
Pressure [kPa]	101.3	344.7	<empty>
Molar Flow [kgmole/h]	45.36	45.36	<empty>
Mass Flow [kg/h]	2318	2318	<empty>
LiqVol Flow [m3/h]	4.406	4.406	<empty>
Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	-1.220e+005	-1.180e+005	<empty>
Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	168.8	171.8	<empty>
Heat Flow [kJ/h]	-5.533e+006	-5.354e+006	1.783e+005

The 'Worksheet' tab is selected at the bottom, with other tabs being Design, Rating, Performance, and Dynamics. There are 'Delete', 'OK', and 'Ignored' buttons at the bottom right.

Fig.V.5

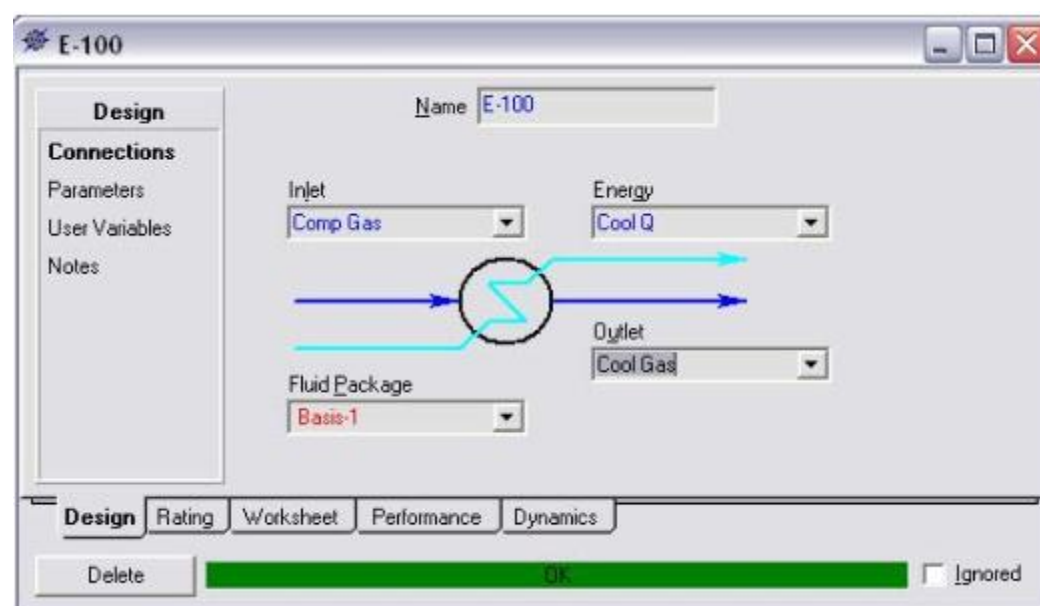


Fig.V.6

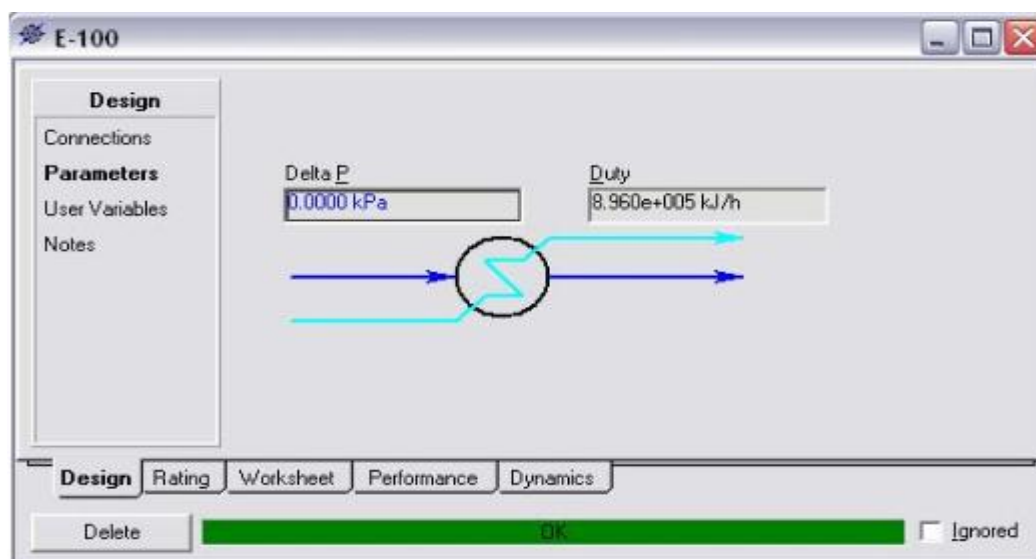


Fig.V.7

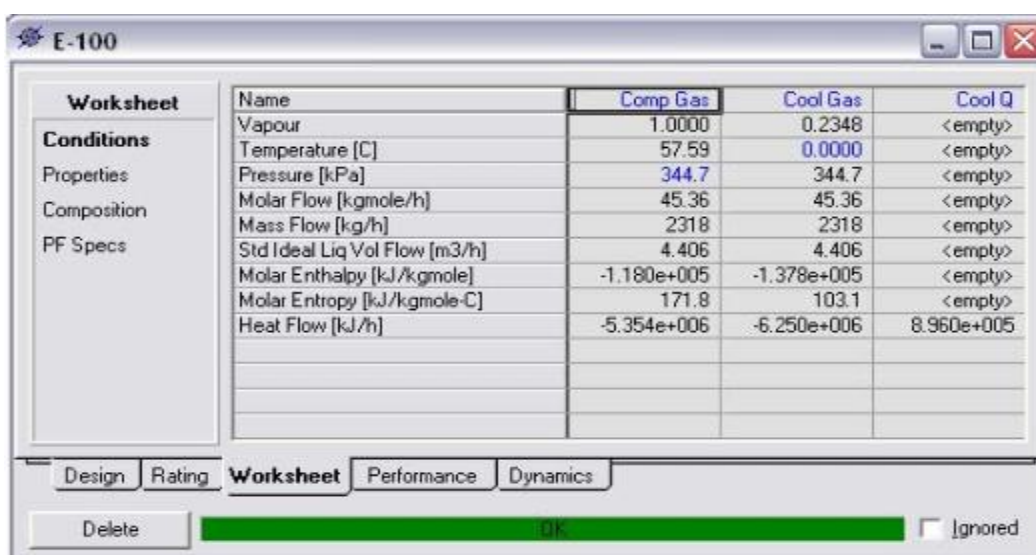


Fig.V.8

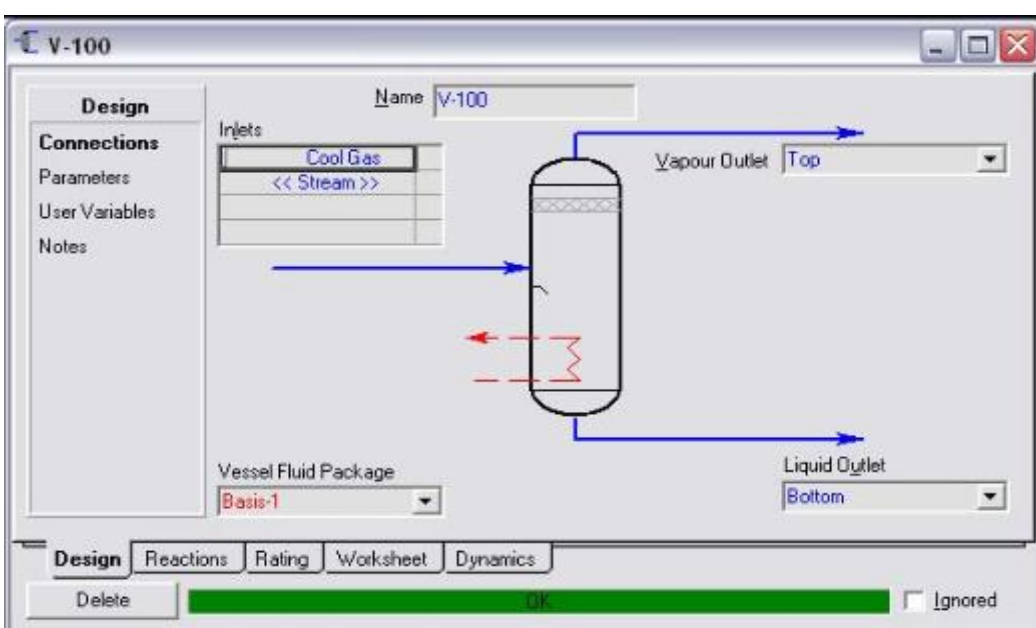
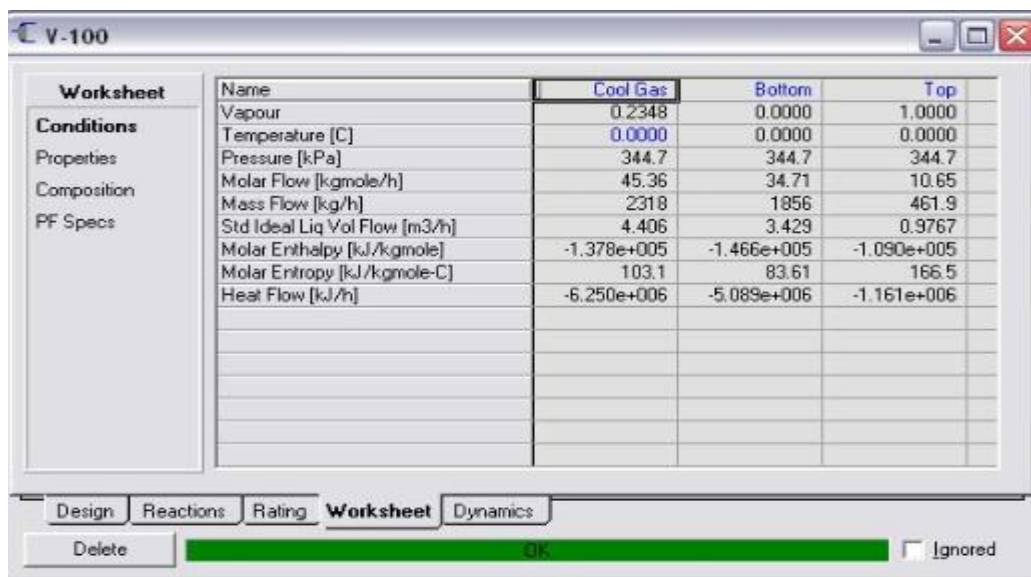


Fig.V.9



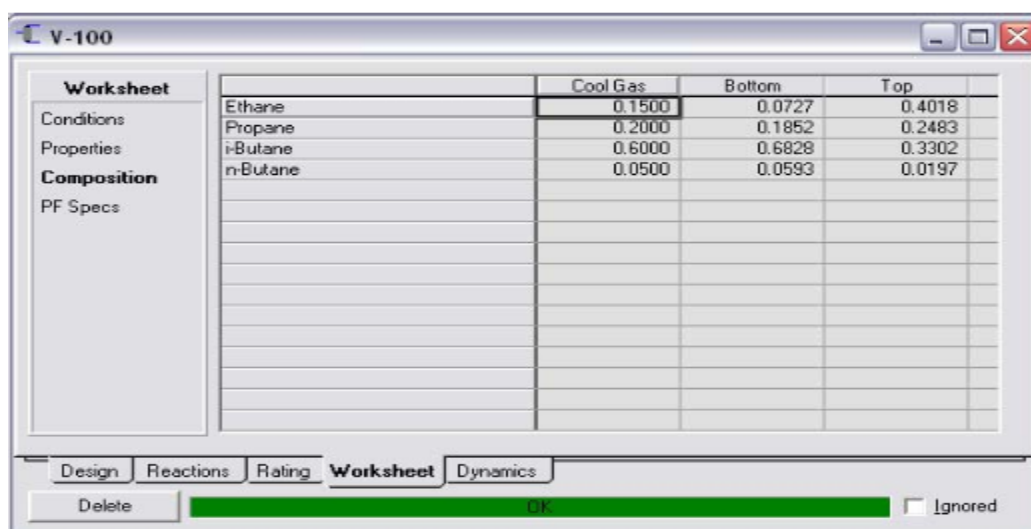
**Worksheet**

Name	Cool Gas	Bottom	Top
Vapour	0.2348	0.0000	1.0000
Temperature [C]	0.0000	0.0000	0.0000
Pressure [kPa]	344.7	344.7	344.7
Molar Flow [kgmole/h]	45.36	34.71	10.65
Mass Flow [kg/h]	2318	1856	461.9
Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	4.406	3.429	0.9767
Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	-1.378e+005	-1.466e+005	-1.090e+005
Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	103.1	83.61	166.5
Heat Flow [kJ/h]	-6.250e+006	-5.089e+006	-1.161e+006

Design Reactions Rating **Worksheet** Dynamics

Delete OK Ignored

Fig.V.10



**Worksheet**

	Cool Gas	Bottom	Top
Ethane	0.1500	0.0727	0.4018
Propane	0.2000	0.1852	0.2483
i-Butane	0.6000	0.6828	0.3302
n-Butane	0.0500	0.0593	0.0197

Design Reactions Rating **Worksheet** Dynamics

Delete OK Ignored

Fig.V.11

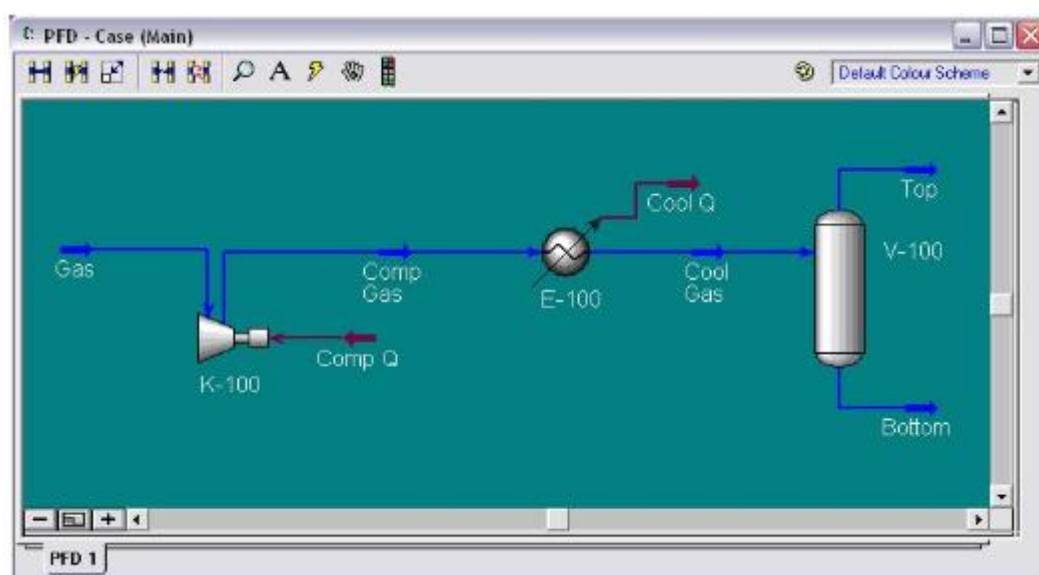


Diagramme du procédé  
(Process Flow  
Diagram, PFD)





# CHAPITRE VI

## Réactions Chimiques

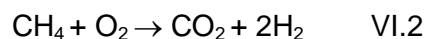
Ce chapitre commence par un problème de développement un modèle qui représente les réactions chimiques en HYSYS. Deux types de réaction seront vont être traitées : les réactions de conversion et les réactions équilibrées.

A la fin de ce chapitre, l'utilisateur sera en mesure de :

- Simuler avec HYSYS les réactions chimiques/les réacteurs chimiques,
- Insérer les réactions à la base de données de la simulation,
- Attacher les réactions chimiques au **Fluid Package**,

### 1. Réactions de conversions

**Exemple :** L'hydrogène peut être produit à partir de l'oxydation partielle du méthane selon les réactions :



Le réacteur est alimenté par un flux de méthane de 100 lgmole/h, qui se trouve à 25 °C et 2 bars, et un autre flux d'air de 260 kgmole/h, qui se trouve à 25 °C et 2 bars.

- Développer un modèle qui représente l'oxydation partielle du méthane pour produire de l'hydrogène,
- Quelles sont les flux molaires du méthane, de l'oxygène, du CO<sub>2</sub>, d'azote, du CO et de l'hydrogène.

#### Etapes à suivre

- Lancer HYSYS,
- Créer une nouvelle simulation « **New Case** »,
- Définir la base de simulation « **Simulation basis Manager** » :  
**Components** : CH<sub>4</sub>, O<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, CO, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>.  
**Fluid Package** Peng-Robinson (PR)
- Ajouter les réactions : Les réactions en HYSYS sont insérées de la même méthode utilisée pour les composés :
  - Cliquer sur l'onglet **Reactions** de la page **Simulation Basis Manager**, cela affichera la fenêtre VI.1,
  - Cliquer sur **Add Rxn** et choisie **Conversion** à partir de la liste affichée. Ajouter les informations nécessaires (coefficients stœchiométriques) comme le montre la figure VI.2,
  - Passer à l'onglet **Basis** et compléter les informations de taux de conversion → Figures VI.3
  - Pour la deuxième réaction, enter les informations des Figures VI.4 et VI.5,
- Insérer une série de réaction (**Reaction Sets**), comme suit :  
 Sur l'onglet **Reactions**, cliquer sur **Add set**. Nommer cette série **Oxydation-set** et ajouter les réactions 1 et 2 (**Rxn-1** et **Rxn-2**) → Figures VI.6 ?
- Ordonner les réactions : dans la page Oxidation Rxn Set, cliquer sur Ranking et entrer les information de la Figure VI.7
- Attacher **Reaction set** au Fluid Package en cliquant sur **Add Set to Fluid Package**, Ajouter un réacteur de conversion à partir de la palette des objets,

- Attacher les courants de méthane et d'air au réacteur → Figures VI.8
- Insérer la série de réactions (**Réaction set**) au réacteur.
- Aller à l'onglet **Worksheet** pour visualiser les résultats → Figure 9.

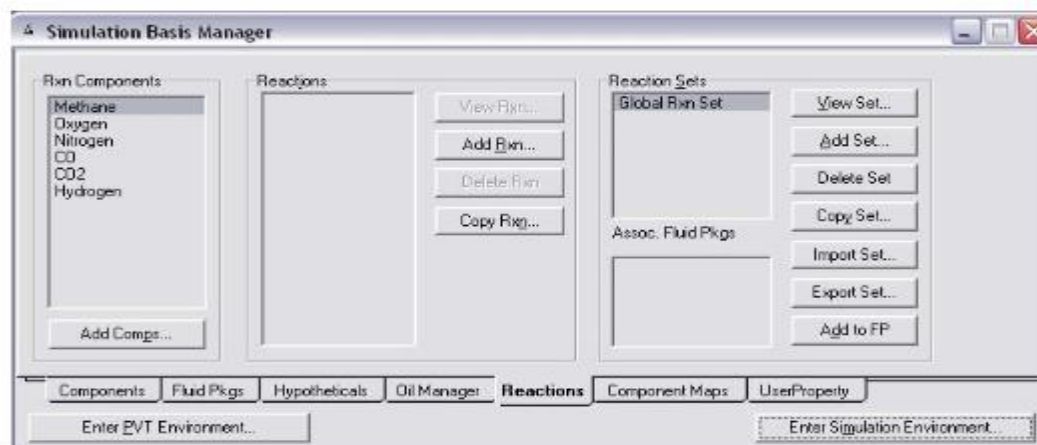


Fig.VI.1

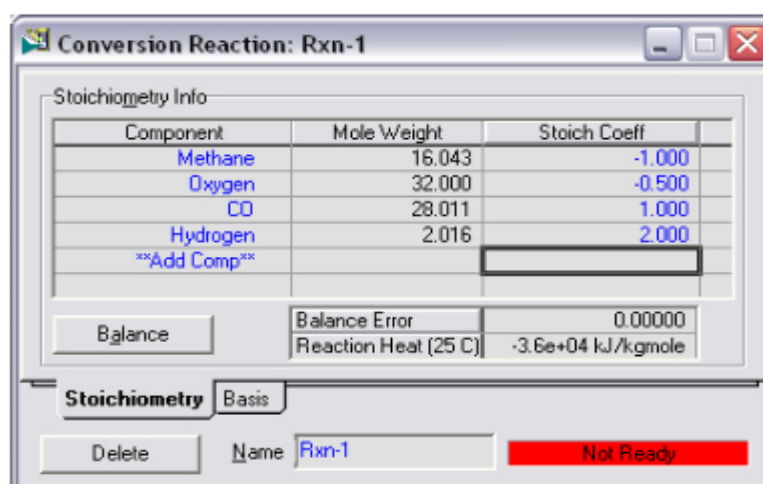


Fig.VI.2

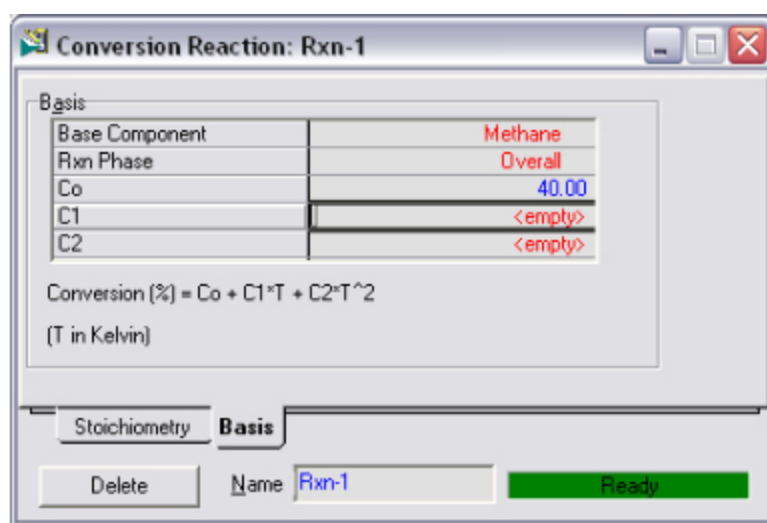


Fig.VI.3

**Conversion Reaction: Rxn-2**

Stoichiometry Info

Component	Mole Weight	Stoich Coeff
Methane	16.043	-1.000
Oxygen	32.000	-1.000
CO2	44.010	1.000
Hydrogen	2.016	2.000
***Add Comp***		

Balance Error: 0.00000  
Reaction Heat (25 C): -3.2e+05 kJ/kgmole

Stoichiometry Basis

Delete Name: Rxn-2 Not Ready

Fig.VI.4

**Conversion Reaction: Rxn-2**

Basis

Base Component	Methane
Rxn Phase	Overall
Co	60.00
C1	<empty>
C2	<empty>

Conversion (%) =  $Co + C1 \cdot T + C2 \cdot T^2$   
(T in Kelvin)

Stoichiometry Basis

Delete Name: Rxn-2 Ready

Fig.VI.5

**Reaction Set: Oxidation Rxn Set**

Name: Oxidation Rxn Set

Set Info

Set Type: Conversion Ready Independent Advanced... Ranking...

Active List	OK	Inactive List	Operations Attached
Rxn-1	<input checked="" type="checkbox"/>	<empty>	
Rxn-2	<input checked="" type="checkbox"/>		
<empty>			

View Active... View Inactive...  
Make Inactive > < Make Active

Fig.VI.6



Fig.VI.7

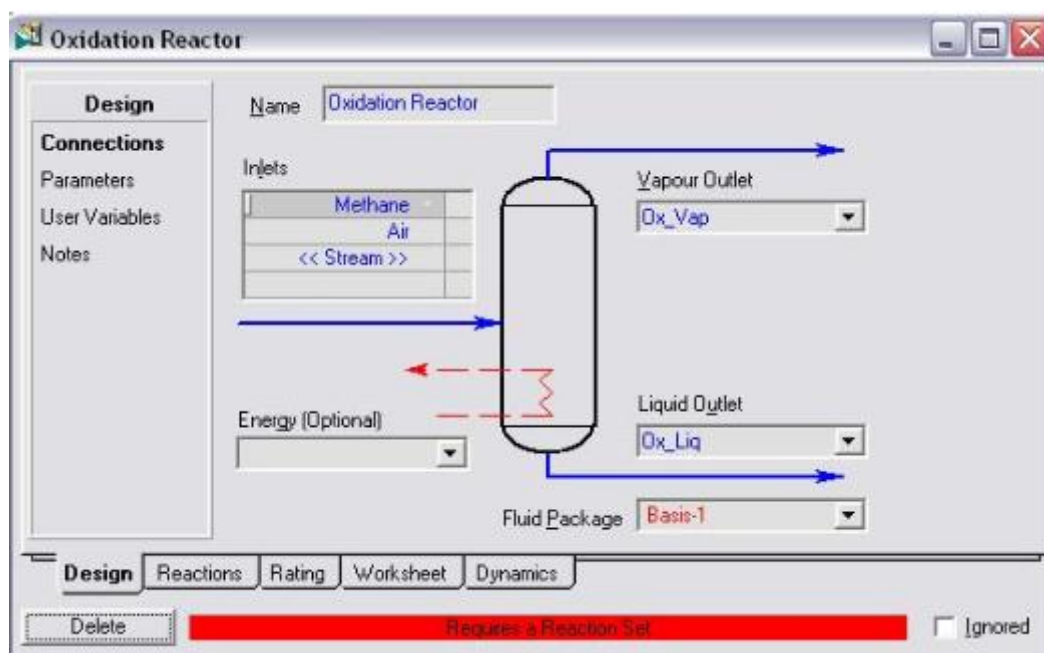


Fig.VI.8

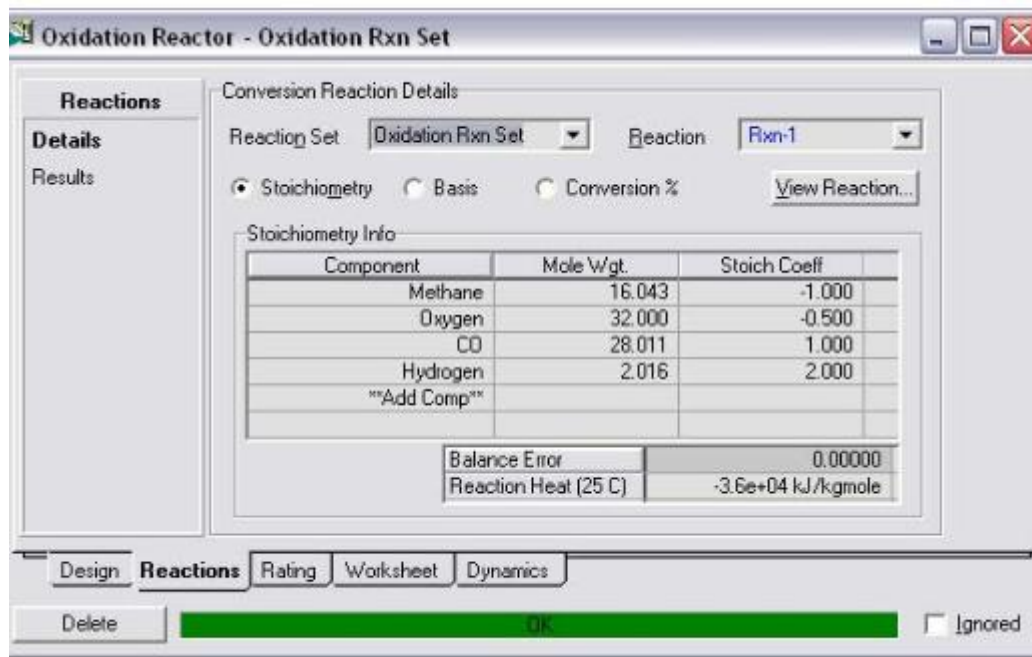
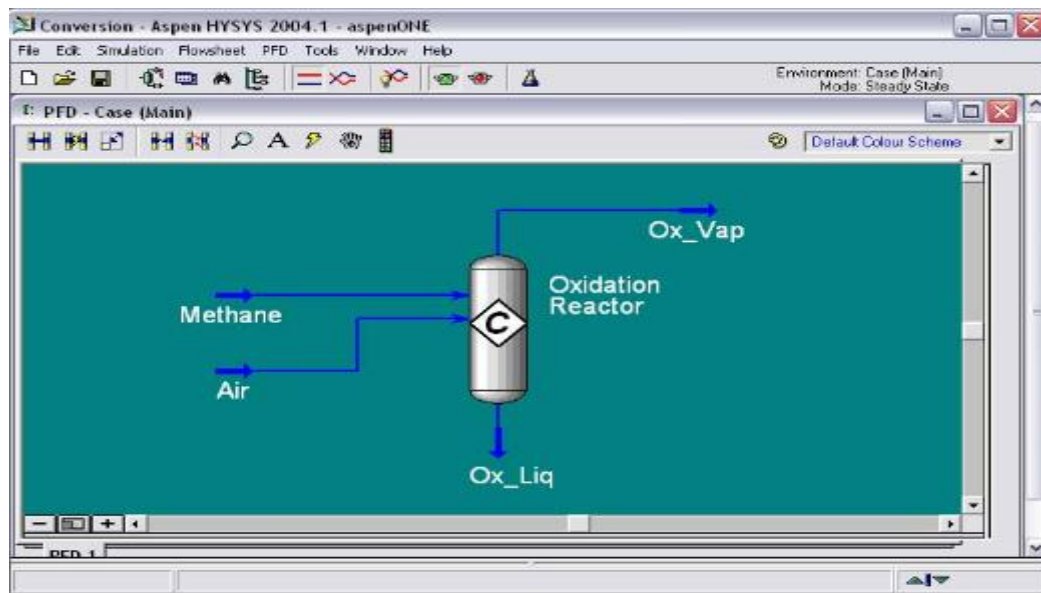


Fig.VI.9



## 2. Réactions équilibrées

**Exemple :** On veut réduire la concentration de CO sortant dans l'effluent gazeux du réacteur précédent (réacteur de conversion). Pour cela, on lave cet effluent gazeux par de l'eau (opération d'absorption avec réaction chimique). La réaction produite durant cette étape est :



La réaction VI.3 non seulement réduit la concentration de CO mais augmente également le rendement de production de H<sub>2</sub>. Les spécifications du courant d'eau de lavage sont : 100 °C, 2 bars, 100 kmole/h et 100-H<sub>2</sub>O.

En continuant sur le diagramme de l'exemple précédent :

- Développer un modèle HYSYS qui représente l'opération de lavage (**attention la réaction est équilibrée** → choisir : **Equilibrium reactor** au lieu de **Conversion reactor**).
- Déterminer les flux de toutes les espèces présentes dans l'effluent final.
- Calculer la réduction (en %) de CO et l'augmentation (en %) de H<sub>2</sub>.

**Remarque :** Utiliser les mêmes étapes décrites dans l'exemple précédent pour ajouter la réaction VI.3 en tant qu'une série de réaction indépendante associée au réacteur équilibré (la première série est associée au réacteur de conversion). Le courant d'eau doit être également inséré.

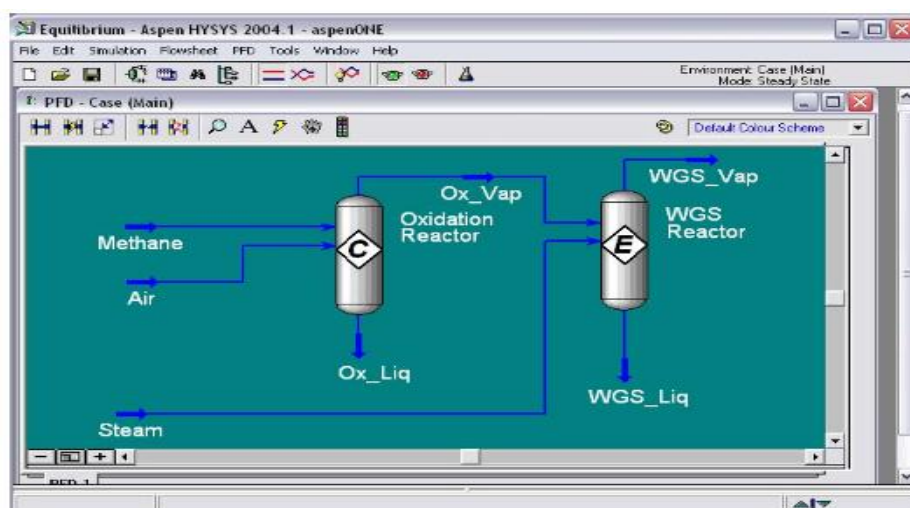
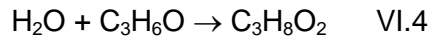


Diagramme  
du procédé

### 3. Réacteur agité continu RAC (Continuously Stirred Tank reactor, CSTR)

**Exemple :** Le propylène glycol peut être produit à partir de l'oxyde de propylène et l'eau selon la réaction suivante :



La réaction se déroule dans un RAC de volume de 280 ft<sup>3</sup>. Le liquide occupe 85 % du volume du réacteur. La réaction est d'ordre 1/ C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>O (l'eau est en excès). La constante de vitesse de la réaction VI.4 est donnée par la relation :

$$K=A \exp(-E/RT) \quad A=1,7.10^{17} \text{ et } E=-2,24. 10^4 \text{ btu/lbmole.}$$

- Développer un modèle HYSYS qui représente un RAC (**attention la réaction est de type cinétique** → choisir : **Kinetics** au lieu de **Conversion**),
- Déterminer l'évolution du taux de conversion en fonction de la température à la sortie du réacteur.

#### Etapes à suivre

- Lancer HYSYS,
- Créer une nouvelle simulation « **New Case** »,
- Définir la base de simulation « **Simulation basis Manager** » :  
**Components** : propylène glycol, propylène oxyde et l'eau.  
**Fluid Package** UNIQUAC
- Cliquer sur **Binary Coeffs** pour estimer les paramètres d'interactions binaires inconnus → Fig. VI.11,
- Ajouter les réactions : cliquer sur l'onglet **Reactions** de la page **Simulation Basis Manager**, cela affichera la fenêtre VI.12,
- Cliquer sur **Add Rxn** et choisir **Kinetics**. Ajouter les informations nécessaires (coefficients stœchiométriques) comme le montre la figure VI.13,
- Dans la colonne **Fwd order**, changer la valeur de H<sub>2</sub>O à 0 pour préciser que l'eau est en excès → Fig. VI.14,
- Passer à l'onglet **Basis** et compléter les informations affichées sur Figures VI.15.
- Passer à l'onglet **Parameters** et compléter les informations de A et E de la constante de vitesse VI.15 → Fig. VI.16.
- Insérer une série de réactions (**Reaction Sets**),
- Attacher **Reaction set** au Fluid Package en cliquant sur **Add Set to Fluid Package**,
- Installer 2 courants d'alimentation :  
C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>O : 75 °F, 1,1 atm, 150 lbmole/h et 100%- C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>O  
H<sub>2</sub>O : 75 °F, 16,7 psia, 11000 lb/h et 100%- H<sub>2</sub>O
- Installer un mélangeur (**Mixer**) à partir de la palette des objets,
- Connecter les courants d'alimentation au mélangeur → Fig. VI.17,
- installer un RAC (CSTR) à partir de la palette des objets et le connecter au courant de sortie du mélangeur → Fig. VI.18
- Attacher la série de réactions au réacteur → Fig. VI.19,
- Spécifier le volume et % du liquide dans le réacteur → Fig. VI.20,
- Fixer la température de sortie du réacteur à 75 °F (réaction isotherme) → Fig. VI.21,
- Cliquer sur le réacteur, puis voir **Results** → Fig. VI.22.
- Changer la valeur de la température et enregistrer les valeurs du taux de conversion.



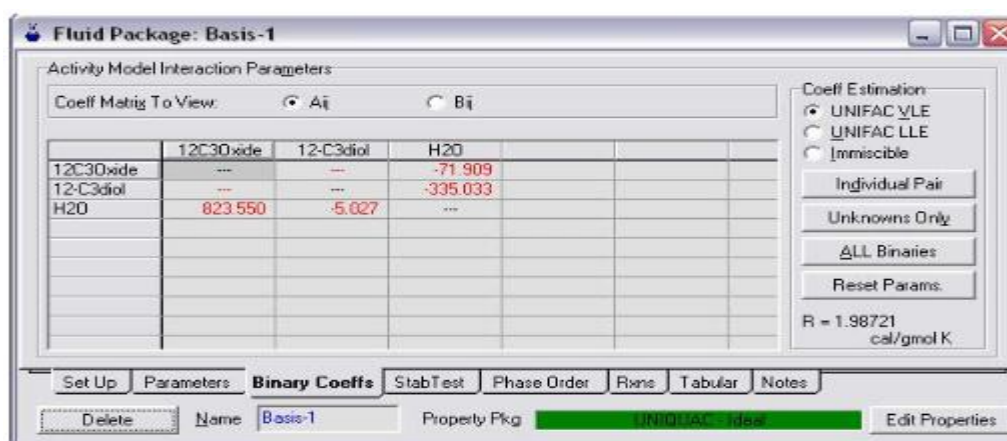


Fig.VI.11

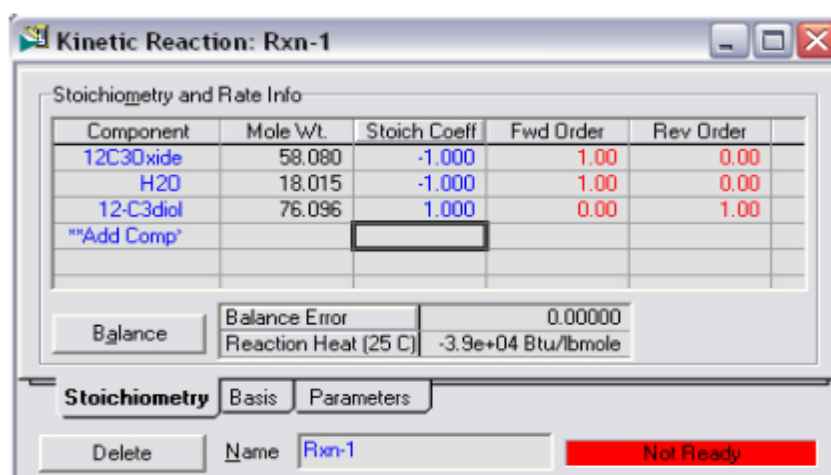


Fig.VI.12

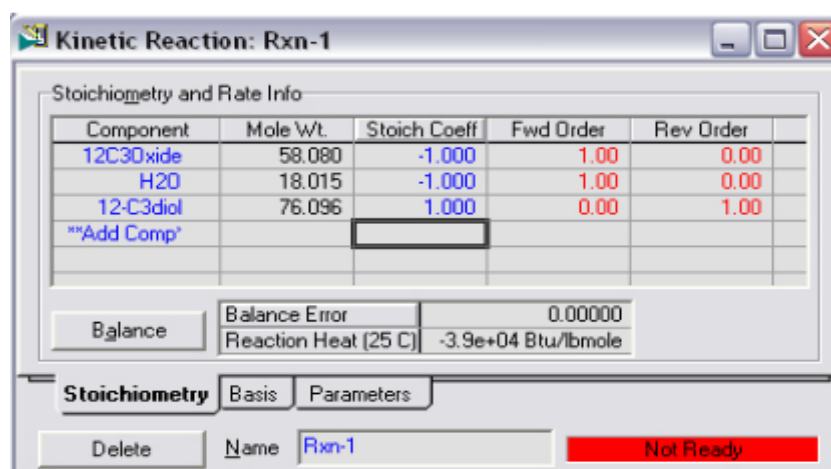
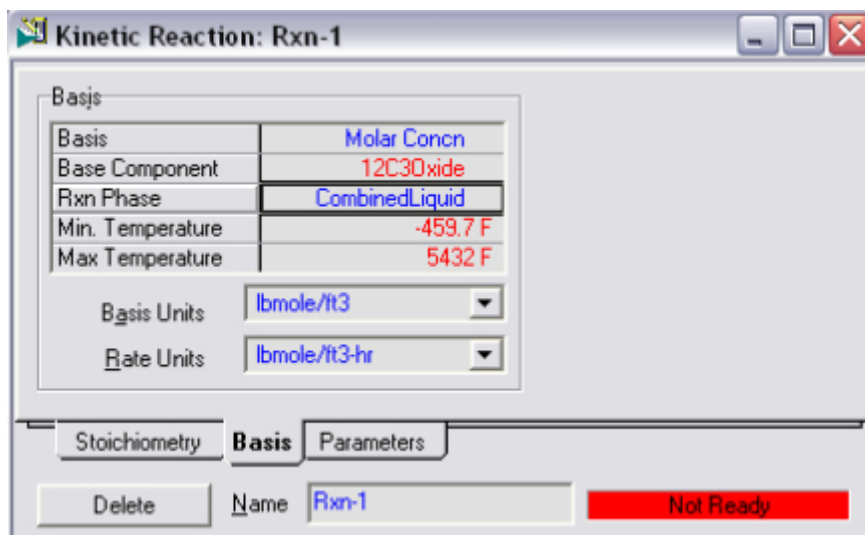


Fig.VI.13



Fig.VI.14





**Kinetic Reaction: Rxn-1**

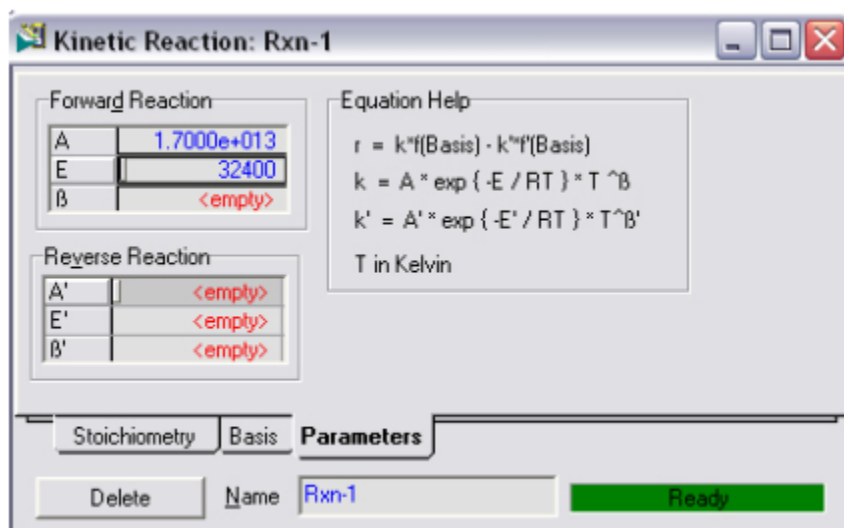
**Basis**

Basis	Molar Conc
Base Component	12C3Oxide
Rxn Phase	CombinedLiquid
Min. Temperature	-459.7 F
Max Temperature	5432 F
Basis Units	lbmole/ft3
Rate Units	lbmole/ft3-hr

Stoichiometry **Basis** Parameters

Delete Name Rxn-1 **Not Ready**

Fig.VI.15



**Kinetic Reaction: Rxn-1**

**Forward Reaction**

A	1.7000e+013
E	32400
B	<empty>

**Reverse Reaction**

A'	<empty>
E'	<empty>
B'	<empty>

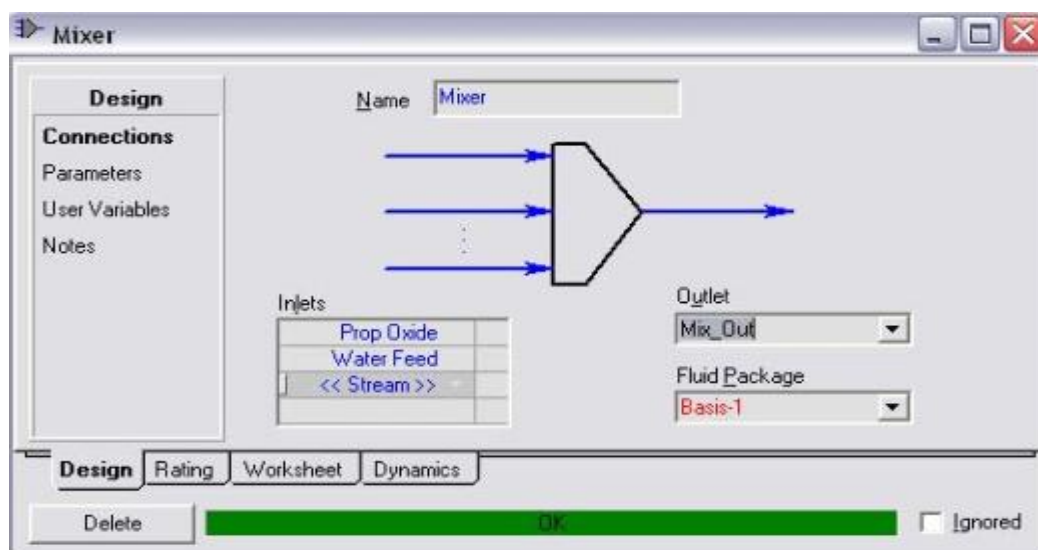
**Equation Help**

$r = k \cdot f(\text{Basis}) \cdot k' \cdot f'(\text{Basis})$   
 $k = A \cdot \exp \{ -E / RT \} \cdot T^B$   
 $k' = A' \cdot \exp \{ -E' / RT \} \cdot T^{B'}$   
 T in Kelvin

Stoichiometry Basis **Parameters**

Delete Name Rxn-1 **Ready**

Fig.VI.16



**Mixer**

Name Mixer

**Design**

**Connections**

Parameters  
User Variables  
Notes

Inlets

Prop Oxide	
Water Feed	
<< Stream >>	

Outlet

Mix\_Out

Fluid Package

Basis-1

**Design** Rating Worksheet Dynamics

Delete OK Ignored

Fig.VI.17

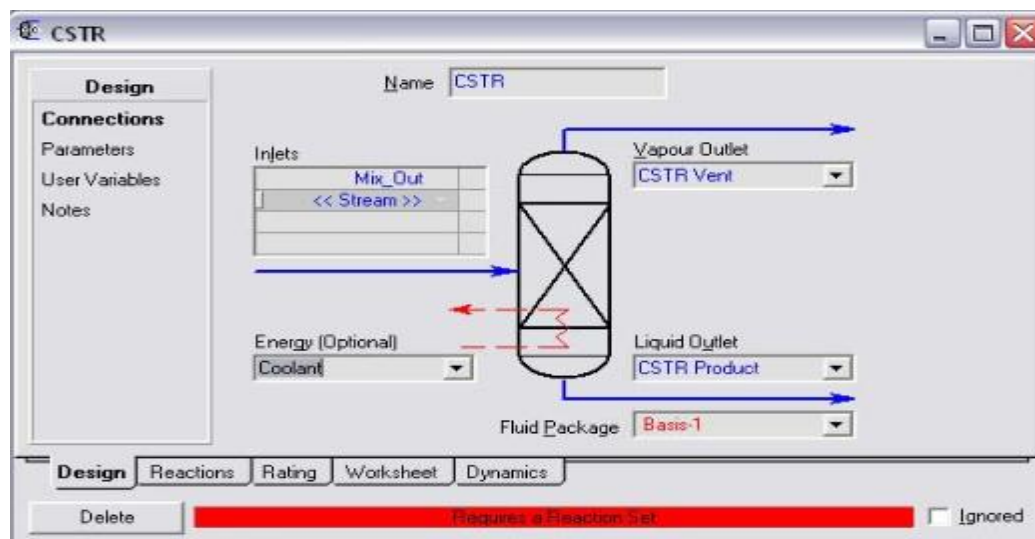


Fig.VI.18

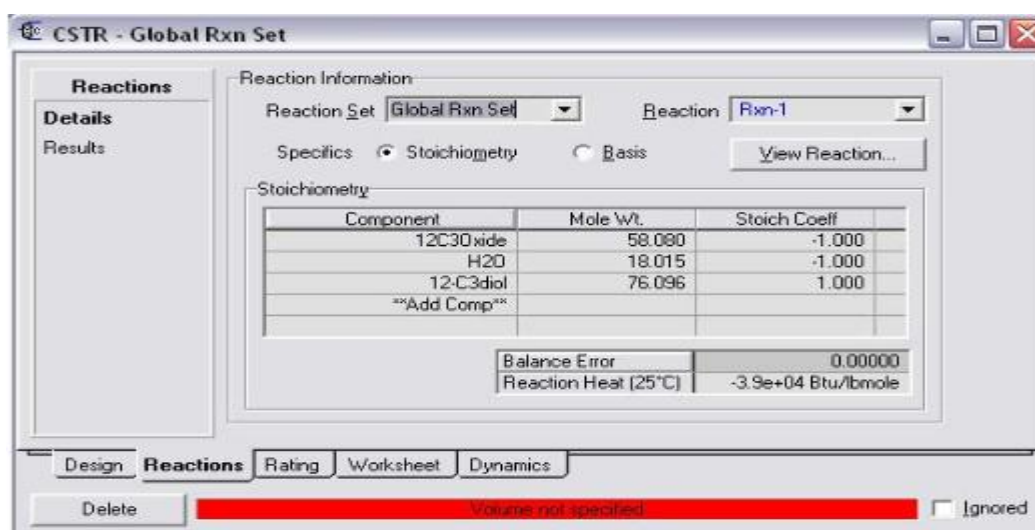


Fig.VI.19

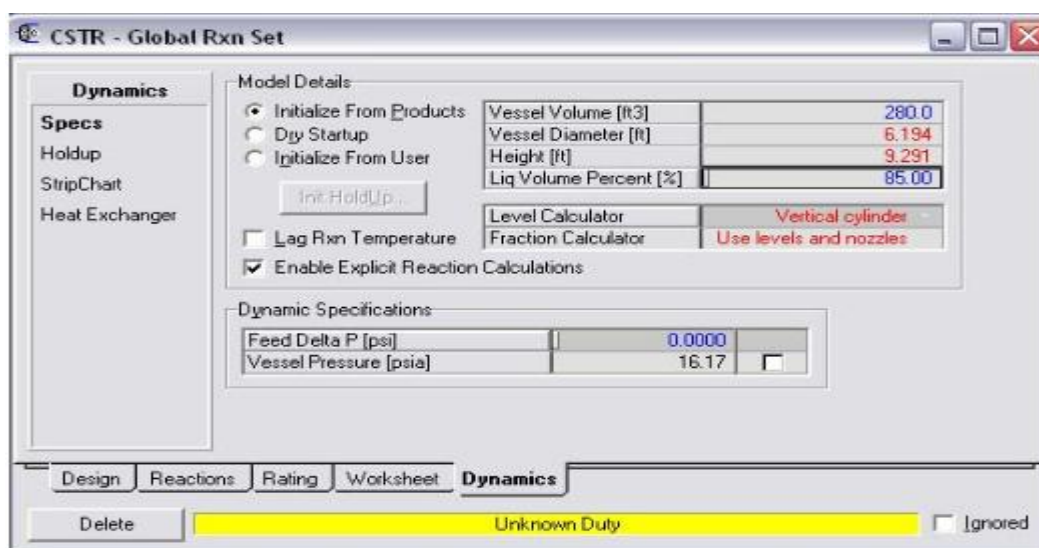


Fig.VI.20

**CSTR - Global Rxn Set**

**Worksheet**

	Mix_Out	CSTR Product	CSTR Vent
Name	0.0000	0.0000	1.0000
Vapour	0.0000	0.0000	1.0000
Temperature [F]	75.00	75.00	75.00
Pressure [psia]	16.17	16.17	16.17
Molar Flow [lbmole/hr]	760.6	700.2	0.0000
Mass Flow [lb/hr]	1.971e+004	1.971e+004	0.0000
Std Ideal Liq Vol Flow [USGPM]	42.84	41.10	0.0000
Molar Enthalpy [Btu/lbmole]	-1.086e+005	-1.214e+005	-5.030e+004
Molar Entropy [Btu/lbmole-F]	0.8824	0.6769	20.68
Heat Flow [Btu/hr]	-8.262e+007	-8.499e+007	0.0000

Design Reactions Rating **Worksheet** Dynamics

Delete OK Ignored

Fig.VI.21

**CSTR - Global Rxn Set**

**Reactions**

Details Results

Reaction Results Summary

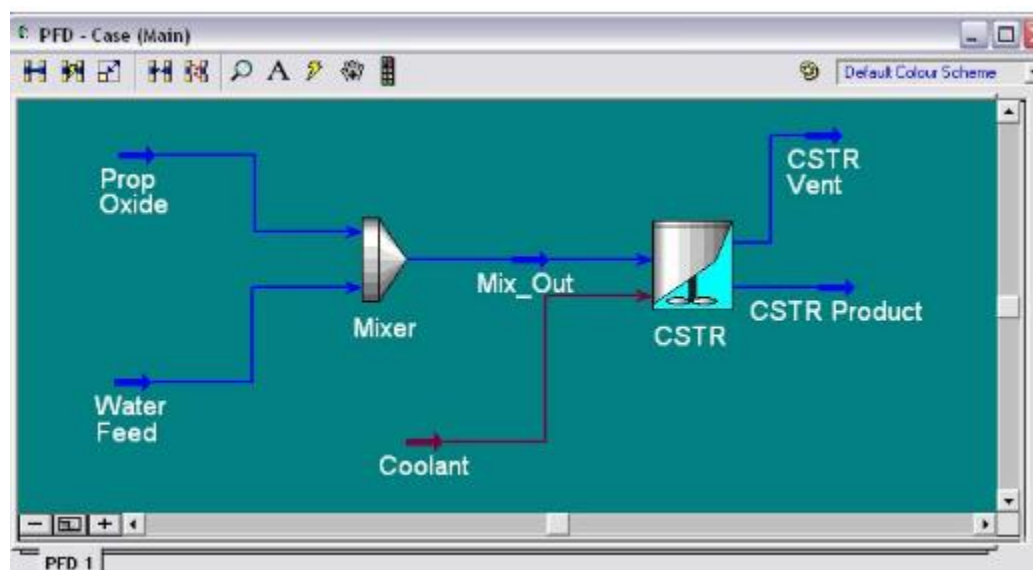
☒ Reaction Extents ☐ Reaction Balance

	Act. % Conv.	Base Comp	Rxn Extent
Rxn-1	40.30	12C3Oxide	60.45

Design **Reactions** Rating Worksheet Dynamics

Delete OK Ignored

Fig.VI.22





## CHAPITRE VII

### Colonne de Distillation

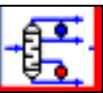
**Ce** chapitre commence par un problème de distillation d'un mélange binaire. Il présente les étapes nécessaires à la simulation des colonnes à distiller à l'aide de l'outil HYSYS. A la fin de ce chapitre, l'utilisateur sera capable de simuler avec HYSYS les colonnes de distillation.

#### Problème :

Un mélange binaire de 70% en mass du benzène et 30 % de toluène est à distiller en distillat ultra-pur en benzène et en résidu ultra-pur en toluène. Les spécifications du courant d'alimentation sont : 1 kgmole/s, 30 °C et 1 atm. Le Taux de reflux est 3.

#### Etapes à suivre

- Lancer HYSYS,
- Créer une nouvelle simulation « **New Case** »,
- Définir la base de simulation « **Simulation basis Manager** » :  
     **Components** : benzène, toluène.  
     **Fluid Package** Peng-Robinson (PR)
- A partir de la palette des objets, installer 3 courants de matière (les nommés **Feed**, **distillate** et **Bottoms**) et 2 courants d'énergie (les nommés **Condenser Energy** et **Re-boiler Energy**) → Fig. VII.1,
- Spécifier le courant d'alimentation : 1 kgmole/s, 30 °C, 1 atm, 70% en mass du benzène,
- Installer une colonne de distillation « **distillation column** » à partir de la palette des objets → Fig. VII.1,
- Double-clique sur la colonne, cela affichera la Fig. VII.2,
- Connecter les courants à la colonne et choisir le type de condenseur (**Total condensor**) comme le montre la Figure VII.2. Cliquer sur **Next**,
- Spécifier les pressions dans le condenseur et le rebouilleur (1 atm) → Fig. VII.3. Cliquer sur **Next**,
- Dans l'étape suivante (Fig. VII.4), HYSYS demande des températures estimées du plateau supérieur (plateau 1), du condenseur, et du rebouilleur. Puisque ce sont des champs facultatifs, ils peuvent être ignorés et HYSYS va les calculer lorsque la simulation est exécutée. Cliquez sur **Next** pour passer à l'étape finale,
- La dernière étape pour configurer entièrement la colonne est de préciser le taux de reflux (**reflux ratio**) et le débit de distillat (**distillate flow**). Un taux de reflux de 3 et un débit de distillat de 2700 kgmol/h ont été spécifiés → Fig. VII.5. Cliquez sur **Done** pour terminer la connexion et les caractéristiques de la colonne de distillation,
- En cliquant sur **Done**, cela fait apparaître une fenêtre affichant toutes les données et les options de la colonne de distillation. Afin d'atteindre un distillat ultra-pur, il a été estimé que la colonne doit fonctionner avec 23 plateaux et l'alimentation entre au plateau numéro 7 (HYSYS définit par défaut le nombre de plateaux à 10 avec la charge entrant au plateau № 5). Changer le nombre de plateaux et le plateau d'alimentation comme le montre la Figure VII.6,
- Finalement, cliquer sur le bouton **Run** pour simuler le processus de distillation. Fermez la fenêtre, et vérifiez que les courants de distillat et de résidu sont tournés bleu foncé, ce qui signifie que HYSYS a résolu avec succès le problème.



Icône de la  
colonne à  
distiller

**Remarque:** Après cette étape, si l'une des caractéristiques de la colonne de distillation est modifiée, le bouton "**Reset**" doit être enfoncé, puis le bouton "**Run**" doit être pressé à nouveau pour relancer la simulation de distillation avec les nouvelles spécifications.

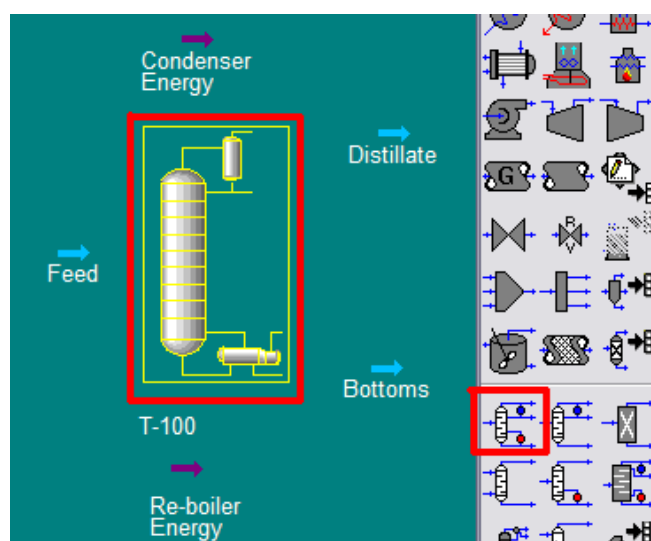


Fig.VII.1

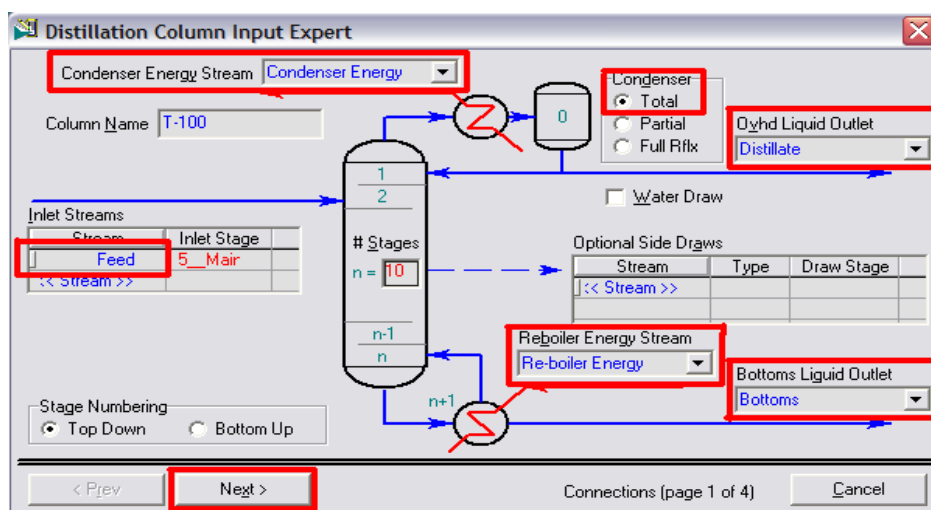


Fig.VII.2

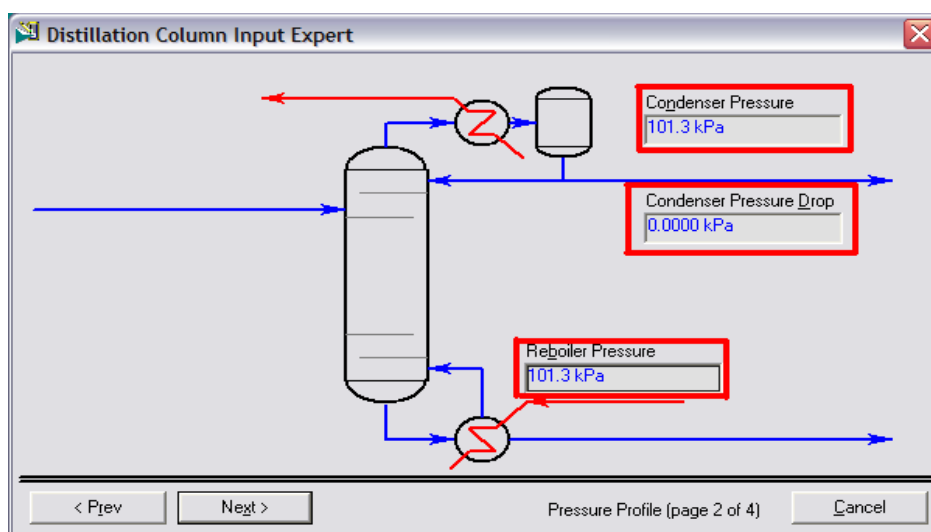


Fig.VII.3

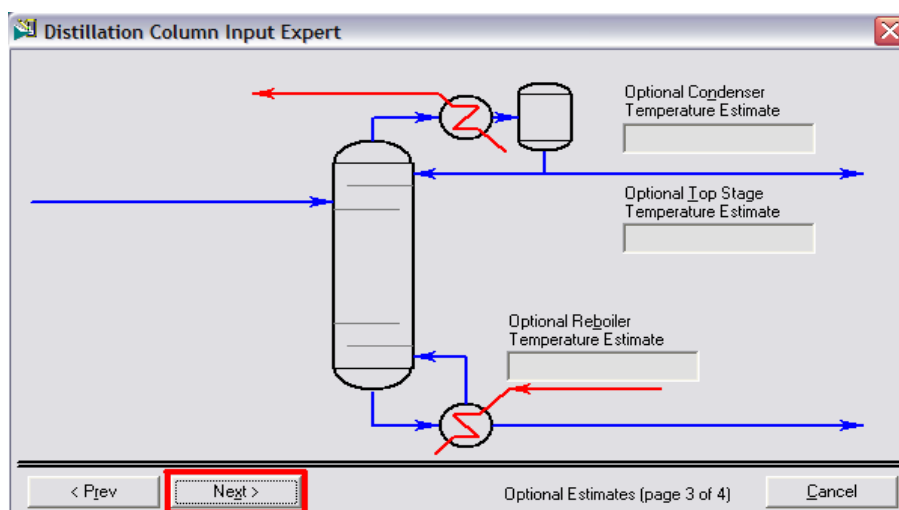


Fig.VII.4

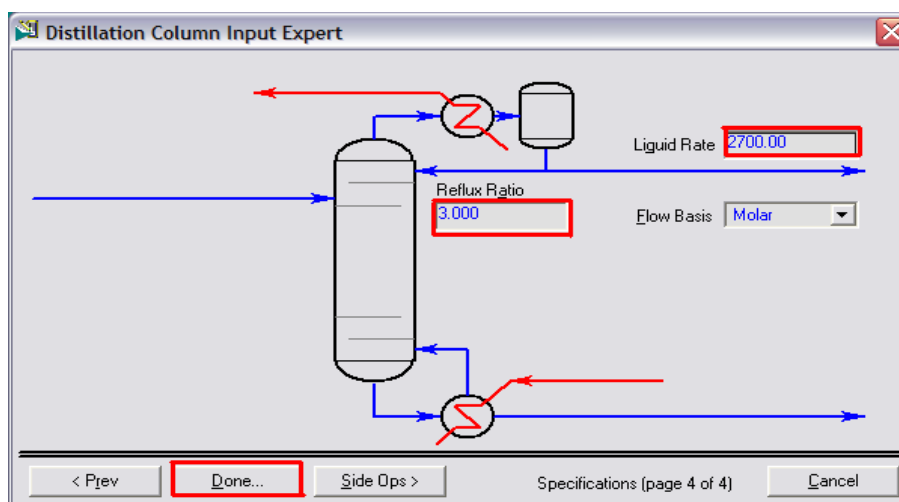


Fig.VII.5

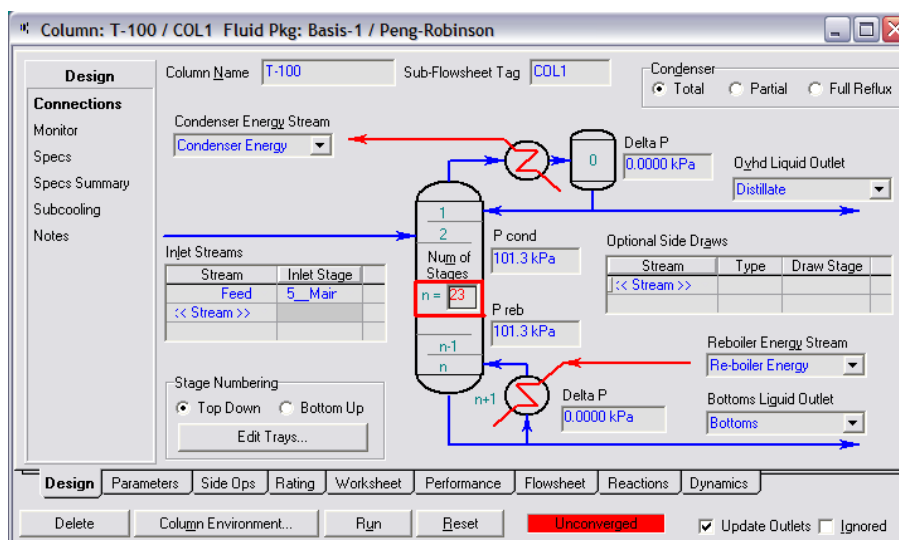


Fig.VII.6

## Spécifications avancées de la colonne de distillation

HYSYS a la possibilité d'utiliser différents autres critères que le taux de reflux et le débit de distillat pour simuler la colonne. Par exemple, le débit de résidu et la composition du distillat peuvent être spécifiés, et HYSYS peuvent simuler la colonne en fonction de ces nouvelles spécifications. Pour changer les critères de spécification de la colonne de distillation suivez les étapes suivantes :

- Double-cliquez sur la colonne, et faire apparaître la fenêtre principale (Figure VII.6),
- Cliquez ensuite sur **Specs** pour faire apparaître la fenêtre de spécification (Figure VII.7),

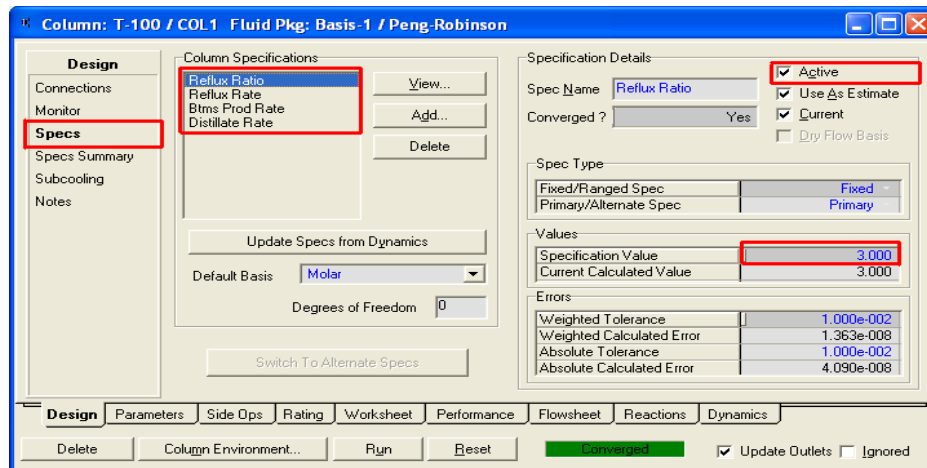


Fig.VII.7

- Dans la colonne **Column Specification**, activer **Btms Prod Rate** et entrer 650 kgmole/h dans le champ **specification value** → Figure VII.8.

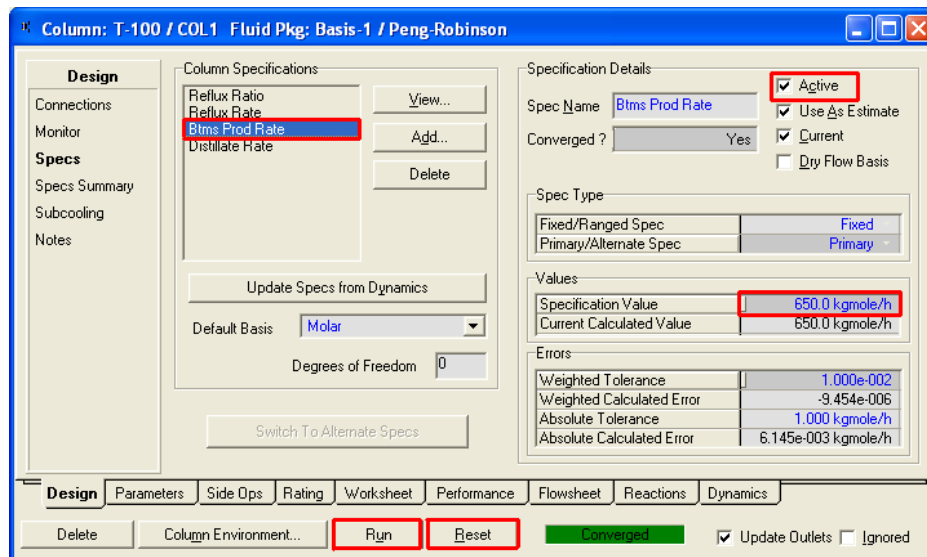


Fig.VII.8

- Désactiver **Distillate rate** tout en réservant **Reflux Ratio** active → Figure VII.9,
- Cliquer **Reset** puis **Run**,



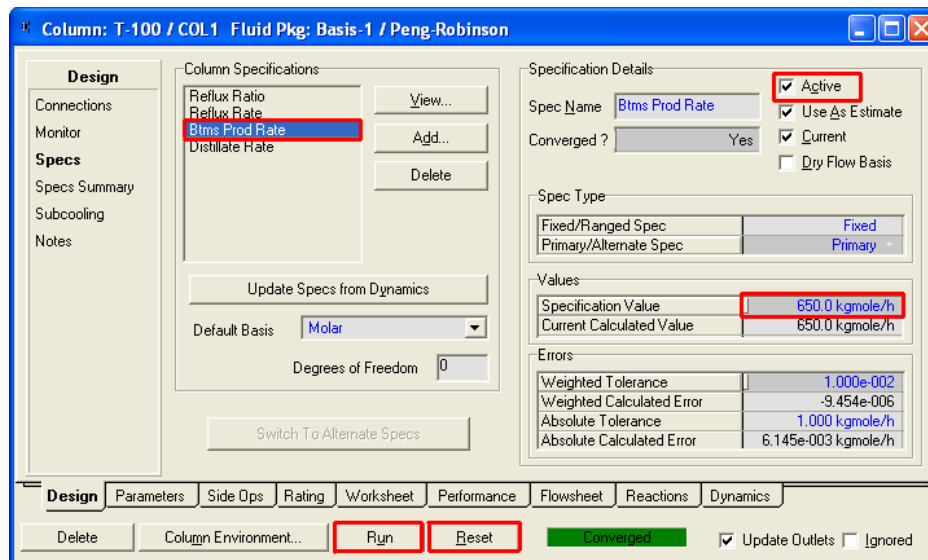


Fig.VII.9

HYSYS a la capacité de simuler la colonne en fonction des compositions de distillat ou de Résidu. Par exemple, une composition de 80% en masse de benzène est nécessaire dans le distillat. Pour utiliser cette spécification :

- Cliquez sur **Add** dans la section **Column Specification** et sélectionnez "**Column component Fraction**" dans la liste. Cliquez ensuite sur **Add Spec** → Figure VII.10,

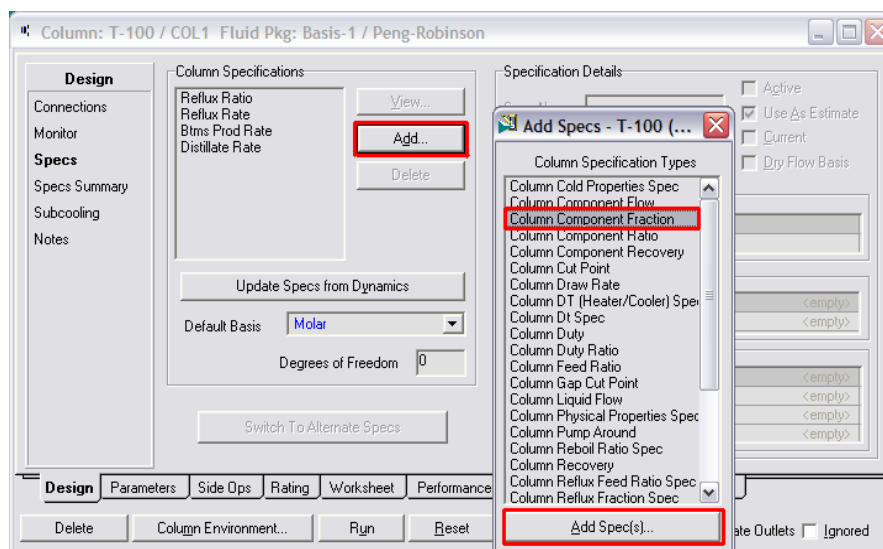


Fig.VII.10

- Compléter les informations comme indiquer sur la Figure VII.11.
- Cliquer **Reset** puis **Run**.

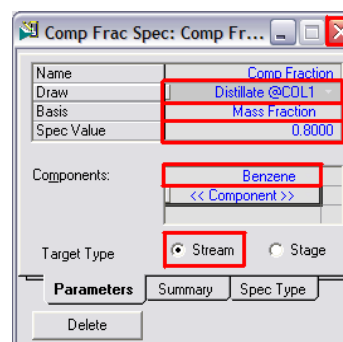


Fig.VII.11



## CHAPITRE VIII

### Colonne d'Absorption

**Ce** chapitre commence par un problème de distillation d'un mélange binaire. Il présente les étapes nécessaires à la simulation des colonnes d'absorption à l'aide de l'outil HYSYS. A la fin de ce chapitre, l'utilisateur sera capable de simuler avec HYSYS les colonnes d'absorption.

#### Problème :

On veut réduire la concentration de CO<sub>2</sub> d'un effluent gazeux contenant 20 % CO<sub>2</sub> et 80 % méthane à l'aide d'un solvant, le méthylène de carbonate, dans une colonne à garnissage. Les spécifications des courants d'entrée sont :

- Effluent gazeux : 7200 m<sup>3</sup>/h, 60 °C, 60,1 atm, composition : 20 % -CO<sub>2</sub> et 80 % CH<sub>4</sub>.
- Solvant : 2000 kgmol/h, 60 °C, 60,1 atm, composition : 100 % - méthylène de carbonate.

#### Etapes à suivre

- Lancer HYSYS,
- Créer une nouvelle simulation « **New Case** »,
- Définir la base de simulation « **Simulation basis Manager** » :
  - Components** : CH<sub>4</sub>, CO<sub>2</sub>, méthylène de carbonate.
  - Fluid Package** Sour Peng-Robinson (Sour PR)
- A partir de la palette des objets, installer 4 courants de matière (les nommés **Gaz in**, **Solvant in**, **gas out** et **liquid out**) → Fig. VII.1,
- Spécifier les courants d'alimentation **Gas in** (effluent gazeux) et **solvant in** (méthylène de carbonate),
- Installer une colonne d'absorption « **absorber** » à partir de la palette des objets,
- Double-clique sur la colonne et connecter les courants à la colonne comme le montre la Figure VIII.1.1. Cliquer sur **Next**,
- Spécifier les pressions dans le haut et le bas de la colonne (60,1atm) → Fig. VIII.2. Cliquer sur **Next**,
- Dans l'étape suivante (Fig. VIII.3), HYSYS demande des températures de haut et de bas de la colonne. Puisque la colonne fonctionne à température constante (60 °C), ces températures doivent être indiquées dans les champs spécifiés. Entrer les températures puis cliquez sur **Done** pour terminer la connexion et les caractéristiques de la colonne d'absorption,
- En cliquant sur **Done**, cela fait apparaître une fenêtre affichant toutes les données et les options de la colonne → Fig. VIII.4.
- Exécuter la simulation en cliquant sur « **Run** », la bonde jaune (**unconverged**) est convertie en vert (**converged**) si toutes les étapes sont correctement suivies. Cependant, jusqu'à ce point les résultats obtenus ne représentent pas le modèle de notre colonne d'absorption car la simulation a été exécutée pour une colonne à plateaux. Pour changer les plateaux par le garnissage, suivez les étapes suivantes :
  - Aller au menu **Tools** et sélectionner **Utilities**, cela affichera la Figure VIII.5,
  - Sélectionner **Tray sizing** puis cliquer sur **add Utility**, la fenêtre de la Figure VIII.6 s'affichera,
  - Nommer l'utilité **Packing** et puis cliquer sur **select TS**, la figure VIII.7 est affichée,
  - Compléter les informations comme le montre la figure VIII.7 puis cliquer sur **OK**,
  - Revenir à la fenêtre **Tray sizing** (Figure VIII.6) et cliquer sur **AutoSection**,



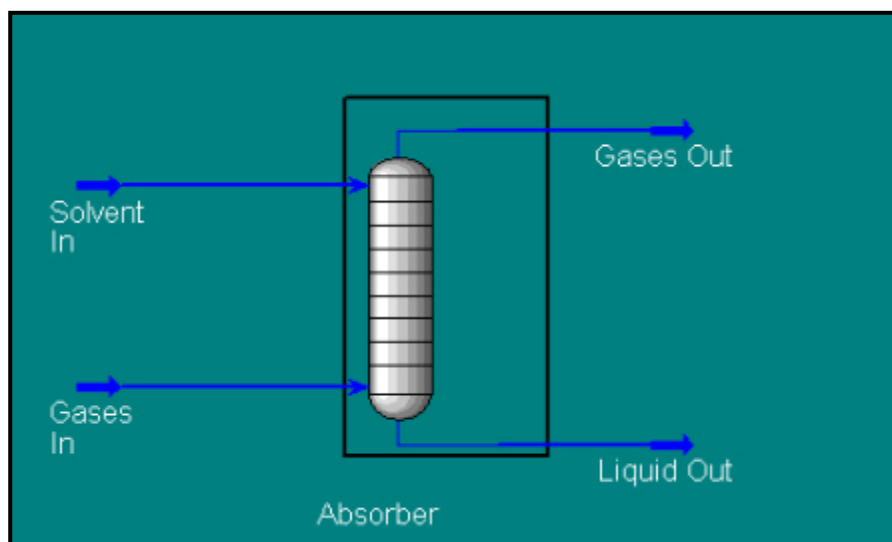
Icône de la  
colonne  
d'absorption

- Dans la fenêtre affichée (Figure VIII.8), sélectionner **Packed** et choisir **Reaching Rings (ceramic 1-4 inch)** comme un modèle de garnissage. Cliquer sur **Next** puis sur **complet autoSection** de la Figure VIII.9,
- Pour visualiser les résultats de la simulation, revenir à la fenêtre **Tray sizing**. Sur l'onglet **Performance** sélectionner **Packed**, cela permet de voir la section et la hauteur de la colonne.
- Aller au PFD. Double-clique sur le courant **Gas uot** et noter la composition de  $\text{CO}_2$ .

Section de la colonne : -----

Hauteur de la colonne : -----

Composition de  $\text{CO}_2$  dans le courant **Gas out** : -----



Flowsheet du process

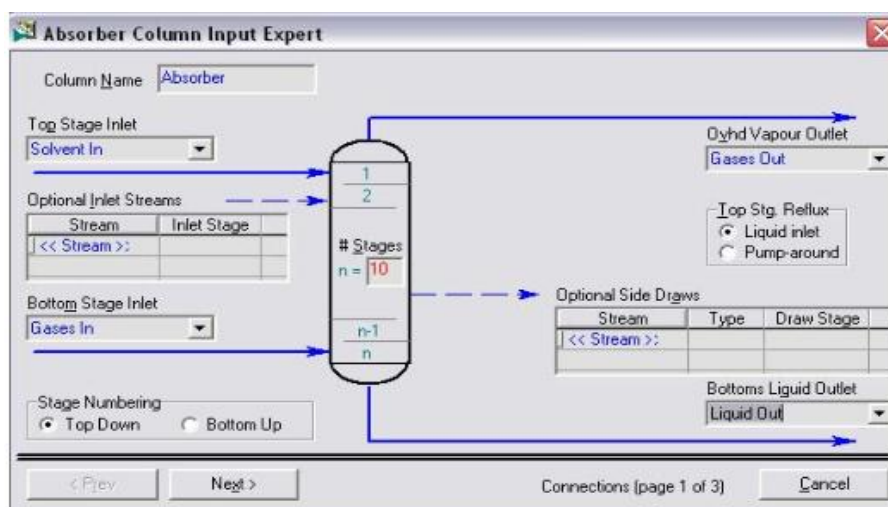


Fig.VIII.1

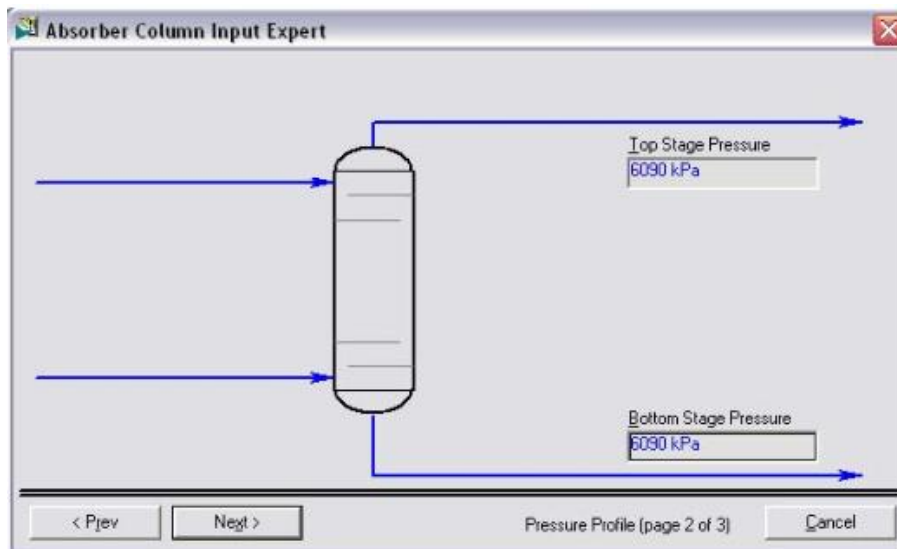


Fig.VIII.2

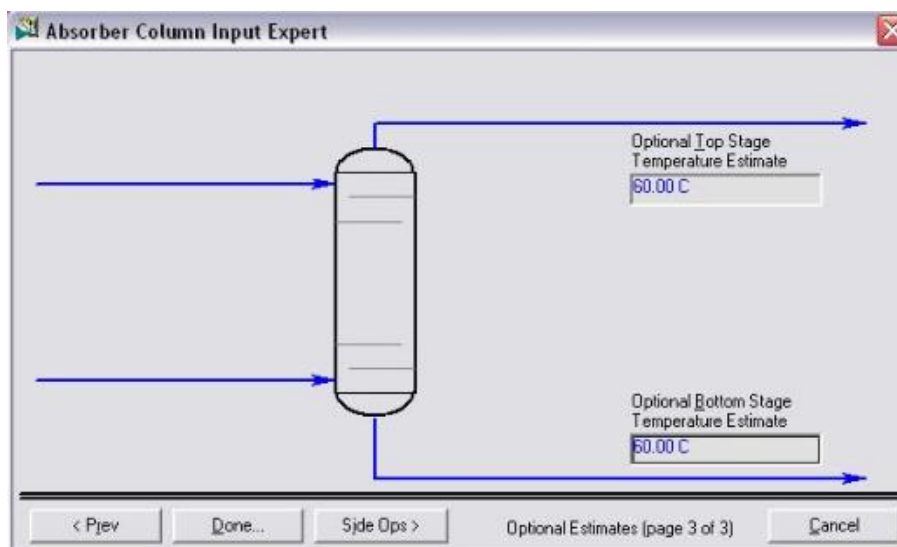


Fig.VIII.3

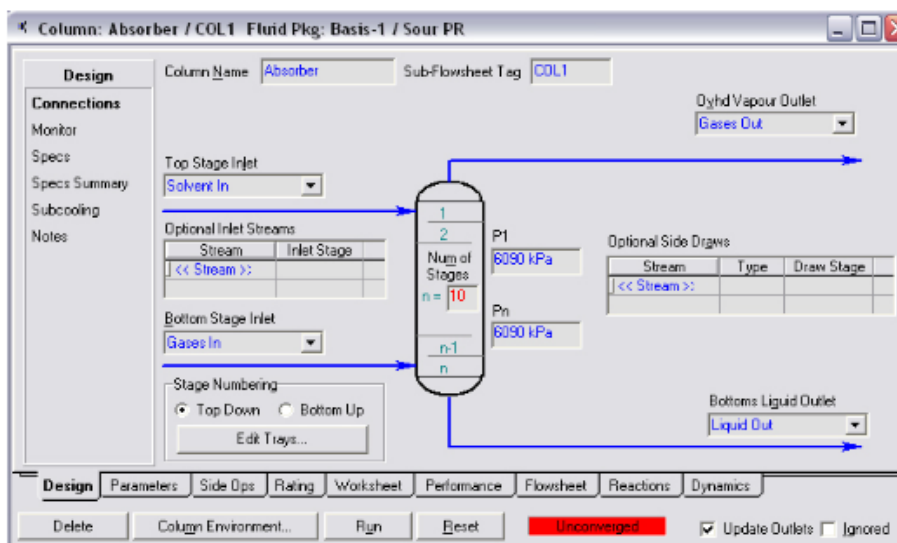


Fig.VIII.4



Fig.VIII.5

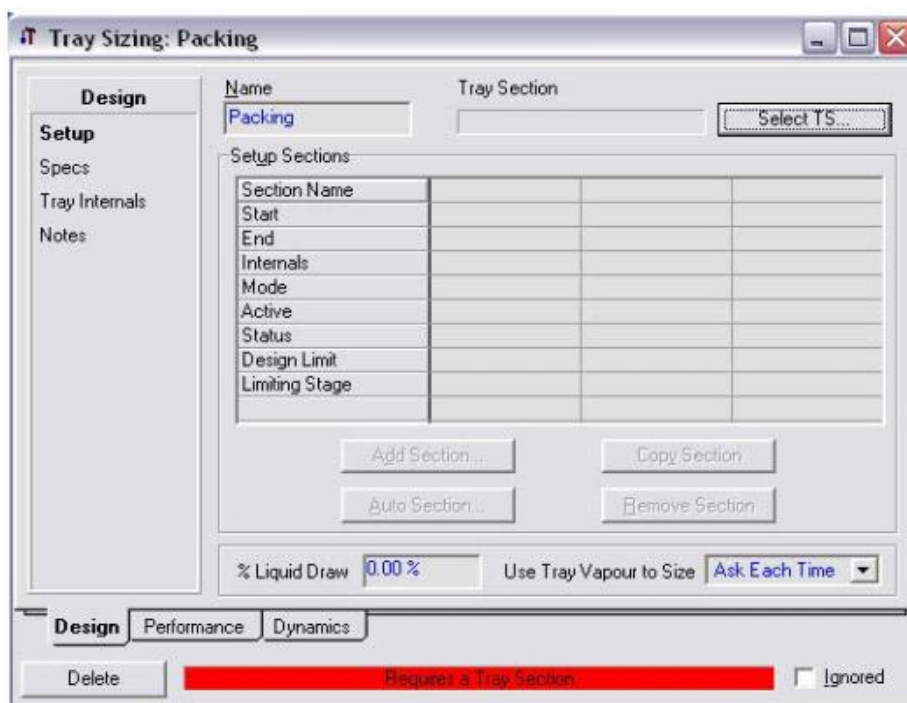


Fig.VIII.6

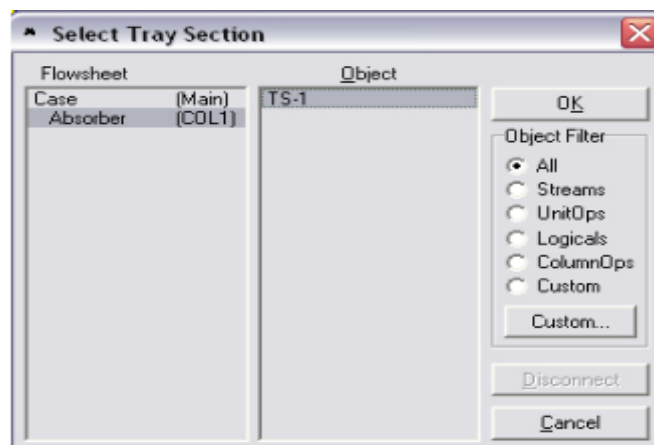
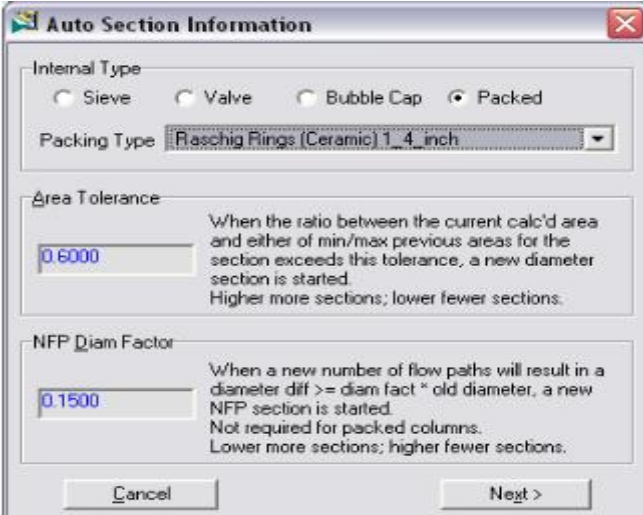


Fig.VIII.7



**Auto Section Information**

Internal Type  
☐ Sieve ☐ Valve ☐ Bubble Cap ☒ Packed

Packing Type: **Raschig Rings (Ceramic) 1\_4\_inch**

Area Tolerance  

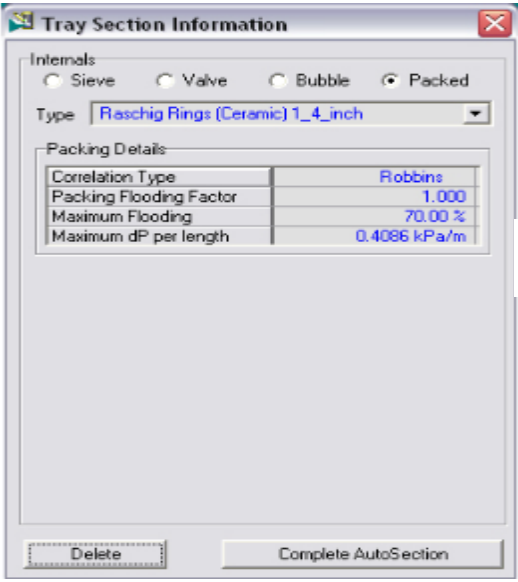
  
When the ratio between the current calc'd area and either of min/max previous areas for the section exceeds this tolerance, a new diameter section is started.  
 Higher more sections; lower fewer sections.

NFP Diam Factor  

  
When a new number of flow paths will result in a diameter diff >= diam fact \* old diameter, a new NFP section is started.  
 Not required for packed columns.  
 Lower more sections; higher fewer sections.

**Cancel** **Next >**

Fig.VIII.8



**Tray Section Information**

Internals  
☐ Sieve ☐ Valve ☐ Bubble ☒ Packed

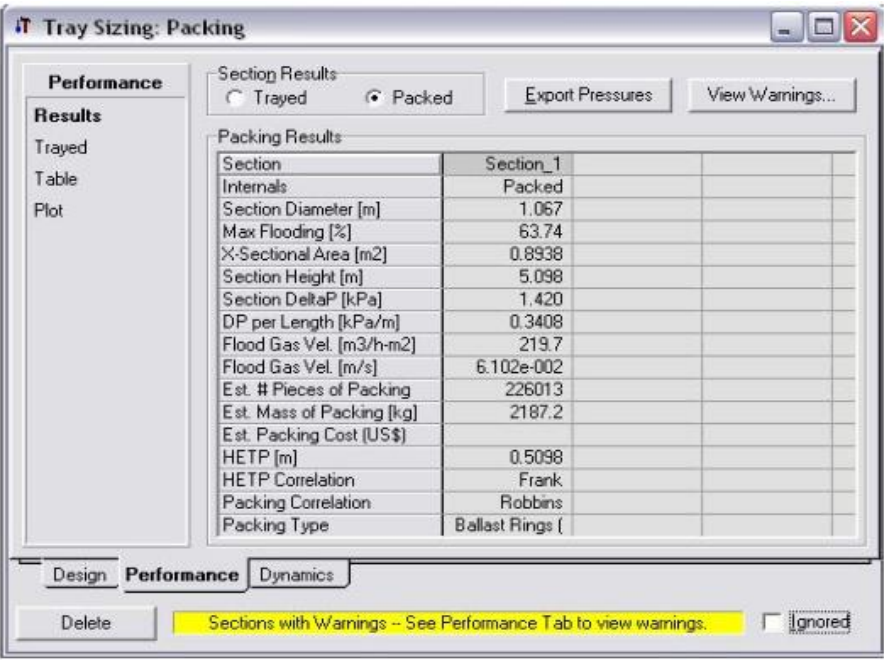
Type: **Raschig Rings (Ceramic) 1\_4\_inch**

Packing Details

Correlation Type	Robbins
Packing Flooding Factor	1.000
Maximum Flooding	70.00 %
Maximum dP per length	0.4086 kPa/m

**Delete** **Complete AutoSection**

Fig.VIII.9



**Tray Sizing: Packing**

Performance  
**Results**  
 Trayed  
 Table  
 Plot

Section Results  
☐ Trayed ☒ Packed **Export Pressures** **View Warnings...**

Packing Results

Section	Section_1		
Internals	Packed		
Section Diameter [m]	1.067		
Max Flooding [%]	63.74		
X-Sectional Area [m2]	0.8938		
Section Height [m]	5.098		
Section DeltaP [kPa]	1.420		
DP per Length [kPa/m]	0.3408		
Flood Gas Vel. [m3/h-m2]	219.7		
Flood Gas Vel. [m/s]	6.102e-002		
Est. # Pieces of Packing	226013		
Est. Mass of Packing [kg]	2187.2		
Est. Packing Cost (US\$)			
HETP [m]	0.5098		
HETP Correlation	Frank		
Packing Correlation	Robbins		
Packing Type	Ballast Rings (		

**Design** **Performance** **Dynamics**

**Delete** **Sections with Warnings - See Performance Tab to view warnings.** ☐ **Ignored**

Fig.VIII.10





## CHAPITRE X

### Exemples

**A**près avoir touché la simulation des principales opérations unitaires en génie chimique, ce chapitre va tester la compétence de l'utilisateur à résoudre des simples problèmes de simulation en génie chimique.